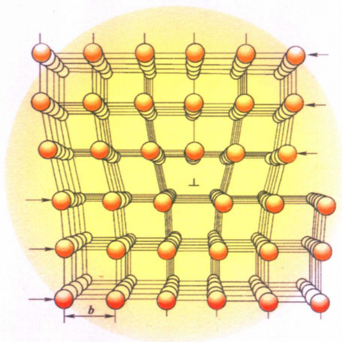
高等学校规划教材

GAODENG XUEXIAO GUIHUA JIAOCAI

位错理论及其应用

王亚男 陈树江 董希淳 编著





冶金工业出版社

http://www.cnmip.com.cn



GAODENG XUEXIAO GUIHUA JIAOCAI



ISBN 978-7-5024-4180-7

9 787502 441807 >

定价 19.00 元

销售分类建议：材料科学

高等学校规划教材

位错理论及其应用

王亚男　陈树江　董希淳　编著

北　京
冶　金　工　业　出　版　社
2007

内 容 提 要

本书系统地介绍了位错的基本理论及其在工程领域中的应用，内容主要包括位错的结构，位错的弹性理论，位错的运动与交割，实际晶体结构中的位错，位错的来源及实验基础，位错理论的应用。

本书可作为金属材料及热处理和其他热加工专业以及冷加工专业的本科生及研究生的教材，也可供相关学科领域科技人员参考。

图书在版编目（CIP）数据

位错理论及其应用/王亚男等编著. —北京：冶金工业出版社，2007.3

高等学校规划教材

ISBN 978-7-5024-4180-7

Ⅰ.位… Ⅱ.王… Ⅲ.位错理论－高等学校－教材 Ⅳ.077

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2007）第 029940 号

出 版 人　曹胜利（北京沙滩嵩祝院北巷 39 号，邮编 100009）

责任编辑　宋　良　李枝梅　美术编辑　李　心　版面设计　张　青

责任校对　符燕蓉　李文彦　责任印制　牛晓波

ISBN 978-7-5024-4180-7

北京百善印刷厂印刷；冶金工业出版社发行；各地新华书店经销

2007 年 3 月第 1 版，2007 年 3 月第 1 次印刷

148 mm×210 mm；5.125 印张；161 千字；155 页；1－3000 册

19.00 元

冶金工业出版社发行部　电话：(010)64044283　传真：(010)64027893

冶金书店　地址：北京东四西大街 46 号(100711)　电话：(010)65289081

（本社图书如有印装质量问题，本社发行部负责退换）

前　言

本书是近几年我们在辽宁科技大学讲授关于位错理论课程的讲义基础上,进行了大量修改和补充而成的。

位错理论自20世纪30年代诞生之日起,经过许多学者的研究和发展,其内容已经十分丰富,并成为了解固体材料尤其是金属材料的物理、化学和力学性质的重要基础。本书的内容既包含位错理论的最基本部分,又包含比较深入的部分,以期读者通过本书能够对位错理论及其应用有一个较完整的认识。不过,位错是一种微观的晶体缺陷,其研究方法无论是理论的还是实验的,都不简单,也不直观。因此,我们在写作时力求深入浅出,对一些较复杂的数学问题给出较详细的推导。但限于作者自身的水平,书中难免存在不妥之处,诚请读者指正。

写作过程中,参考了许多文献,并选用了一些图片和数据,在此向文献作者表示谢意。

编　者

2006年12月

目　录

绪　论

自20世纪20年代末起，人们对金属单晶的塑性变形进行了系统的研究。1926年弗兰克尔(J.Frankel)按着晶体塑性变形是通过滑移面整体滑移这样的概念计算出的完整晶体的理论切变强度比当时用实验测得的切变强度值约高1000倍。为了解释这个差异，在1934年，泰勒(G.I.Taylor)、奥罗万(E.Orowan)及波兰伊(M.Polanyi)几乎同时提出了晶体中存在位错的假设，晶体在切应力作用下位错容易滑移，并引起塑性变形，该位错后来被称为刃型位错。1938年弗兰克尔发现在外力作用下位错线的运动，提出了一种动态的位错点阵模型。1939年柏格斯(J.M.Burgers)提出了螺型位错的概念和柏氏矢量，使位错的概念普遍化，并发展了位错应力场的一般理论，接着位错理论得到多方面的发展。1940年派尔斯(R.Peierls)提出半点阵模型，到1947年在纳巴罗(F.R.Nabarro)的帮助下，计算出了使位错滑移所需的临界切应力(P-N力)。从1934年位错提出以后，人们用来解释各式各样的塑性变形问题，并经历了大约15年之久的理论发展，但由于没有进行位错的直接实验观察，因此当时关于晶体中存在位错的问题，尚未获得实验的证明。因而在一部分解释塑性变形的位错理论中往往带有一定的任意性，使得当时部分科学家对位错理论持怀疑和非难态度。

自1949年之后，位错理论的发展进入了一个新时期。1949年柯垂尔(A.H.Cottrell)提出位错与溶质原子的作用问题，用碳原子钉扎位错来解释钢中屈服点的现象获得成功(Cottrell 气团)，弗兰克尔的螺型位错促进晶体生长的理论预告获得了令人信服的证实。1940年布拉格(Bragg)的皂泡筏实验获得了位错存在的第一个“证据”，而后许多人几乎同时独立地在显微镜下观察到了位错的存在及其形状。特别是在1956年鲍曼(Bollman)在不锈钢中，赫许(P.B.Hirsch)在铝中独立地发现用透射电镜透过减薄到约10^2 nm的金属膜直接观察到位错和位错在应力作用下的运动，赫许在20世纪80年代初已制作了位错运动的影片，同时还有一些其他关于位错的实验结果。这对于晶体中位错的结构、分布、动力学性质

以及位错与塑性变形的关系等提供了确切可靠的资料，证实了位错理论的一些基本论点和许多细节，为进一步发展塑性变形的位错理论奠定了巩固的基础，使位错理论趋于成熟。

位错理论的骨架已经确定，这不仅表现在位错理论已完全能够解释塑性变形中的力学问题以及位错能通过实验直接观察到，重要的还在于位错理论的确立促进了其他理论的发展。例如 1940 年柏格斯和布拉格就提出了晶界的位错模型，20 世纪 50 年代这个模型得到了大量实验资料的证实，从而促进了晶界理论的发展。目前位错理论不仅仅局限于塑性变形等问题，在滞弹性、断裂、相变、晶体的电磁性能、晶体的光学性质以及超导体等领域位错理论也愈来愈重要。

位错理论的发展历史较短，还存在一些不完善之处。弗兰克和斯蒂兹(J.W.Steeds)在 1975 年的一篇“晶体位错”的评论中指出：位错有些理论是确切的，因为它们是纯几何的或纯形貌的。有些部分显然是近似的，然而是可靠的。但现在有意义的问题是不能确信那些已做的近似的可靠性，因此必须依靠全部的理论方法以及观察和推测来谋求进一步发展。除了这些“近似”之外，在位错领域中迄今还没有完全解决的主要问题是如何填补单个位错的性质和位错集团的行为之间的鸿沟。因此，位错理论尚有待今后进一步发展和完善。

1 位错的结构(Structure of Dislocation)

1.1 位错的基本类型(Basic Types of Dislocation)

位错是晶体原子排列的一种特殊组态。从位错的几何结构来看,可将它们分为两种基本类型,即刃型位错和螺型位错。已滑移区(Slip Zone)与未滑移区在滑移面(Slip Plane)上的交界线,称为位错线,一般简称为位错。

1.1.1 刃型位错(Edge Dislocation)

刃型位错的晶体结构如图 1.1 所示。设该晶体结构为简单立方晶体,在其晶面 *ABCD* 上半部存在有多余的半片原子面 *EFGH*,这个半原子面中断于 *ABCD* 面上的*EF* 处,它好像一把刀刃插入晶体中,使 *ABCD* 面上下两部分晶体之间产生了原子错排,故称刃型位错,多余半原子面与滑移面的交线 *EF* 就称作刃型位错线。

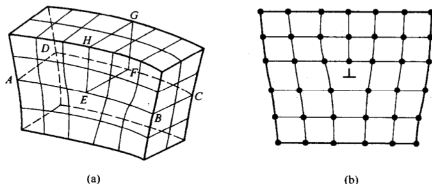


图 1.1 含有刃型位错的晶体结构
(a) 立体模型;(b) 平面图

刃型位错的特征如下:

1) 刃型位错有一个多余的半原子面。一般把多余的半原子面在滑移面上边的称为正刃型位错,记为“⊥”;而把多余的半原子面在滑移面下

边的称为负刃型位错,记为“┬”。其实这种正、负之分只具相对意义,而无本质的区别。

2) 刃型位错线可理解为晶体中已滑移区与未滑移区的边界线。它不一定是直线,可以是折线或曲线,但它必与滑移方向(Slip Direction)垂直,也垂直于滑移矢量(Slip Vector)。

3) 滑移面必是同时包含有位错线和滑移矢量的平面,在其他面上不能滑移。由于刃型位错中,位错线与滑移矢量互相垂直,因此由它们所构成的平面只有一个。

4) 晶体中存在刃型位错之后,位错周围的点阵发生弹性畸变(Elastic Distortion),既有切应变,又有正应变。就正刃型位错而言,滑移面上方点阵受到压应力,下方点阵受到拉应力;负刃型位错与此相反。

5) 在位错线周围的过渡区每个原子具有较大的平均能量,但该区只有几个原子间距宽,所以它是线缺陷(Line Defect)。

1.1.2 螺型位错(Screw Dislocation)

螺型位错的晶体结构如图 1.2 所示。设立方晶体右侧受到切应力 τ 的作用,其右侧上下两部分晶体沿滑移面 $ABCD$ 发生了错动,如图 1.2(a)所示,这时已滑移区和未滑移区的边界线 bb' 平行于滑移方向。图 1.2(b)是 bb' 附近原子排列的俯视图,图中圆点“·”表示滑移面 $ABCD$ 下方的原子,圆圈“°”表示滑移面 $ABCD$ 上方的原子。可以看出,在 aa' 右边的晶体上下层原子相对错动了一个原子间距,而在 bb' 和 aa' 之间出现一个约有几个原子间距宽的、上下层原子位置不吻合的过渡区,原子的正常排列遭到破坏。如果以 bb' 为轴线,从 a 开始,按顺时针方向依次连接此过渡区的各原子,则其走向与一个右螺旋线的前进方向一样,见图 1.2(c)。这就是说,位错线附近的原子是按螺旋形排列的,所以把这种位错称为螺型位错。

螺型位错的特征如下:

1) 螺型位错无多余半原子面,原子错排是呈轴对称的。根据位错线附近呈螺旋形排列的原子旋转方向不同,螺型位错可分为右旋和左旋螺型位错。

2) 螺型位错线与滑移矢量平行,因此一定是直线。

3) 纯螺型位错的滑移面不是唯一的。凡是包含螺型位错线的平面

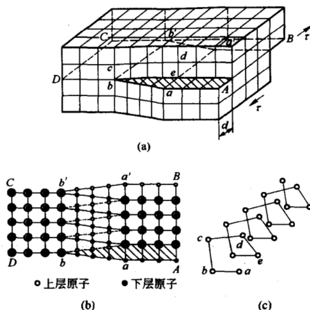


图 1.2 螺型位错

都可以作为它的滑移面。但实际上,滑移通常是在那些原子密排面上进行的。

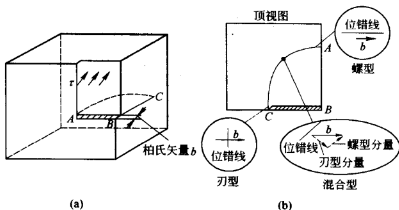
4) 螺型位错线周围的点阵也发生了弹性畸变,但只有平行于位错线的切应变而无正应变,即不会引起体积膨胀和收缩,且在垂直于位错线的平面投影上,看不到原子的位移,看不到有缺陷。

5) 螺型位错周围的点阵畸变随离位错线距离的增加而急剧减少,故它也是包含几个原子宽度的线缺陷。

1.1.3 混合型位错(Mixed Dislocation)

除了上面介绍的两种基本型位错外,还有一种形式更为普遍的位错,其滑移矢量既不平行也不垂直于位错线,而与位错线相交成任意角度,这种位错称为混合型位错,见图 1.3。混合型位错线是一条曲线,在 A 处位错线与滑移矢量平行,因此是螺型位错;而在 C 处位错线与滑移矢量垂直,因此是刃型位错。A 与 C 之间,位错线既不垂直也不平行于滑移矢量,每一小段位错线都可分解为刃型和螺型两个部分。

由于位错线是已滑移区与未滑移区的边界线,因此一根位错线不能终止于晶体内部,而只能露头于晶体表面或晶界。它若终止于晶体内部,



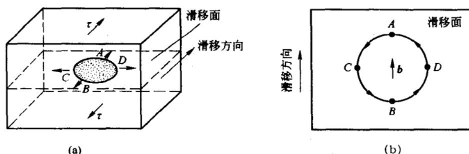
(a)　　(b)

(c)

图 1.3　混合型位错

则必与其他位错线相连接，或在晶体内部形成封闭线即位错环，见图 1.4。图中的阴影区是滑移面上一个封闭的已滑移区即位错环，位错环各处的位错结构类型可按各处的位错线方向与滑移矢量的关系分析，如 A、B 两处是刃型位错，C、D 两处是螺型位错，其他各处均为混合型位错。

有纯刃型位错环，无纯螺型位错环。即刃型位错线可以是直线，曲线；而螺型位错线只能是直线，不能是曲线。



(a) (b)

图 1.4 晶体中的位错环

1.2 位错的结构特征

为了便于描述晶体中的位错,更确切地表征不同类型位错的特征,1939 年柏格斯提出了采用柏氏回路(Burgers Circuit)来定义位错,借助一个规定的矢量即柏氏矢量来揭示位错的本质。

1.2.1 柏氏矢量(Burgers Vector)的确定

柏氏矢量可以通过柏氏回路来确定,图 1.5(a)、(b)分别为含有一个刃型位错的实际晶体和用作参考的不含位错的完整晶体。确定该位错柏氏矢量的方法如下:

1) 首先选定位错线(ξ)的正向,通常规定出纸面的方向为位错线的正方向。

2) 在实际晶体中,从任一原子出发,围绕位错以一定的步数作一左旋闭合回路 *MNOPQ*,称为柏氏回路,如图 1.5(a)所示。

3) 在完整晶体中按同样的方向和步数作相同的回路,该回路并不闭合,由终点 Q 向起点 M 引一矢量 $\boldsymbol{b}$,使该回路闭合,如图 1.5(b)所示。这个矢量 $\boldsymbol{b}$ 就是实际晶体中位错的柏氏矢量。

由图 1.5 可知,刃型位错的柏氏矢量与位错线垂直,这是刃型位错的一个重要特征。刃型位错的正负可用右手法则来确定,如图 1.6 所示。用右手的拇指、食指和中指构成直角坐标,以食指指向位错线的方向,中指指向柏氏矢量的方向,则拇指的指向代表多余半原子面的位向,且规定拇指向上者为正刃型位错,反之为负刃型位错。

螺型位错的柏氏矢量也可按同样的方法确定,如图 1.7 所示。由图

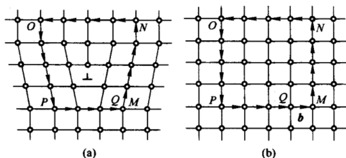


图 1.5　刃型位错柏氏矢量的确定

(a) 实际晶体的柏氏回路;(b) 完整晶体的相应回路



图 1.6　刃型位错的右手三指定则

可知,螺型位错的柏氏矢量与位错线平行,且规定 $\boldsymbol{b}$ 与位错线正向平行者为右螺型位错,$\boldsymbol{b}$ 与位错线反向平行者为左螺型位错。

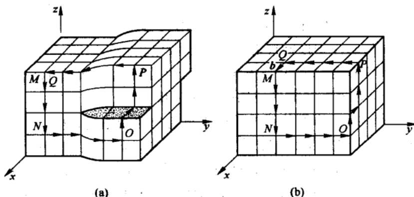


图 1.7　螺型位错柏氏矢量的确定

(a) 实际晶体的柏氏回路;(b) 完整晶体的相应回路

混合型位错的柏氏矢量既不垂直也不平行于位错线,而与它相交成 θ 角,可将其分解成垂直和平行于位错线的刃型分量($\boldsymbol{b}_e = \boldsymbol{b}\sin\theta$)和螺型分量($\boldsymbol{b}_s = \boldsymbol{b}\cos\theta$),如图 1.8(a)所示。

用矢量图解法可形象地概括出三种类型位错的主要特征,见图 1.8(b)。

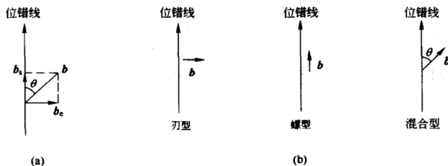


图 1.8 混合型位错柏氏矢量的确定

1.2.2 柏氏矢量的表示法

柏氏矢量的大小和方向可以用它在晶轴(Crystallographic Axis)上的分量,即用点阵矢量 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{c}$ 来表示。对于立方晶系晶体,由于 $a = b = c$,故可用与柏氏矢量 $\boldsymbol{b}$ 同向的晶向指数(Orientation Index)来表示。例如柏氏矢量等于从体心立方晶体的原点到体心的矢量,则 $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{a}/2 + \boldsymbol{b}/2 + \boldsymbol{c}/2$,可写成 $\boldsymbol{b} = \frac{a}{2}[111]$。一般立方晶系中柏氏矢量可表示为 $\boldsymbol{b} = \frac{a}{n} < uvw >$,其中 n 为正整数。

通常还用 $|\boldsymbol{b}| = \frac{a}{n}\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$ 来表示柏氏矢量的大小,即位错强度。同一晶体中,柏氏矢量愈大,表明该位错导致点阵畸变愈严重,它所处的能量也愈高。

1.2.3 柏氏矢量的守恒性(Conservation)

对于一定的位错其柏氏矢量是固定不变的,叫守恒性。反映在三个方面:

(1) 一条位错线只有一个柏氏矢量。

证明:如图 1.9 所示,设有一条位错线 AO,柏氏回路为 B_1,其柏氏

矢量为 $\boldsymbol{b}_1$,移动到结点 O 后,分为两个位错 OB 和 OC,其柏氏矢量分别为 $\boldsymbol{b}_2$和 $\boldsymbol{b}_3$,$\boldsymbol{b}_2$和 $\boldsymbol{b}_3$的柏氏回路为 B_2和 B_3合成为 B_{2+3},B_1应与 B_{2+3}等价,所以 $\boldsymbol{b}_1=\boldsymbol{b}_2+\boldsymbol{b}_3$。表明一条位错线分为两根时,其柏氏矢量只有一个。

(2) 一个位错环只有一个柏氏矢量。

证明:如图 1.10 所示,设有一个位错环(Loop)$ABCD$,将它分为两部分 $ABCEA$ 和 $AECDA$,其柏氏矢量分别为 $\boldsymbol{b}_1$和 $\boldsymbol{b}_2$,这表明两部分晶体变形不同,那么中间就要出现一个柏氏矢量为 $\boldsymbol{b}_3$的位错。

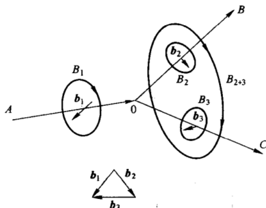


图 1.9　位错线分解

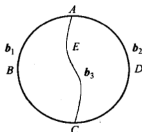


图 1.10　位错环

现设:CDA 动,ABC 不动,出现了 $\boldsymbol{b}_3$,在 A 处 $\boldsymbol{b}_1$分解为 $\boldsymbol{b}_2$和 $\boldsymbol{b}_3$,$\boldsymbol{b}_3=\boldsymbol{b}_1-\boldsymbol{b}_2$;同理:$CDA$ 不动,ABC 动,也出现了 $\boldsymbol{b}_3$,在 A 处 $\boldsymbol{b}_2$分解为 $\boldsymbol{b}_1$和 $\boldsymbol{b}_3$,$\boldsymbol{b}_3=\boldsymbol{b}_2-\boldsymbol{b}_1$。

因为实际上没有 AEC,只有 $ABCD$ 位错环,所以 $\boldsymbol{b}_3=0$,故 $\boldsymbol{b}_1=\boldsymbol{b}_2$,即一个位错环只有一个柏氏矢量。

(3) 多个位错相遇指向同一个结点或都离开同一个结点,它们的 $\boldsymbol{b}$ 之和等于 0。

证明:如图 1.11 所示,四根位错线均指向 0 点,则有 $\boldsymbol{b}_1+\boldsymbol{b}_2+\boldsymbol{b}_3+\boldsymbol{b}_4=0$,即 $\sum\boldsymbol{b}_i=0$。

(4) 推论:晶体中的位错,或自由封闭,或终止在晶体表面或晶界处,不能在晶体中中断(不可能中止在晶体内部)。

证明:如图 1.12 所示,设位错 AB 的柏氏矢量为 $\boldsymbol{b}$,中断于 B 点。根

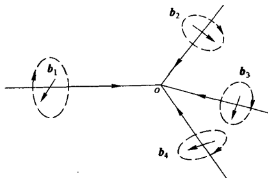


图 1.11 位错线相交

据位错的定义:设Ⅰ区为已滑移区,Ⅱ区为未滑移区,则Ⅲ区有两种情况:1)Ⅲ区为已滑移区,则Ⅱ-Ⅲ区的界线 BC 必是一段位错线;2)Ⅲ区为未滑移区,则Ⅰ-Ⅲ区的界线 BC' 必是一段位错线。所以无论是哪种情况,BC 或 BC' 都是 AB 伸向晶体表面的延伸线,柏氏矢量也为 $\boldsymbol{b}$,这就证明了位错线不能中断在晶体内部。

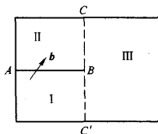


图 1.12 位错线 AB 中断于 B 点示意图

2 位错的弹性(Elastic)理论

位错的存在使晶体中的原子偏离原来的平衡位置(Equilibrium Position),产生了点阵畸变,而原子间作用力又有一种使其回到原来平衡位置的趋势,这样在晶体内部便产生了内应力场(Stress Field)。位错所引起的内应力从中心到四周逐渐减小,中心处的畸变最大,内应力也最大。这种内应力分布就构成了位错的应力场。位错弹性理论的基本问题是对位错周围弹性应力场的计算,进而还可以推算位错所具有的能量、位错线张力、位错间的作用力,以及位错与其他晶体缺陷之间的相互作用等一些特性。为此,一般采用位错的连续介质模型,把晶体作为各向同性的弹性体来处理,直接采用胡克定律和连续函数进行理论计算。这一章将讨论在弹性连续介质中位错的应力场,以及与此有关的位错的应变能、位错之间的作用力、位错与溶质原子的交互作用及位错的塞积等。

2.1 弹性力学的基本知识

2.1.1 弹性体(Elastic Solid)及弹性连续介质

去掉外力后能恢复原状的物体称为弹性体。

弹性连续介质是对晶体作了简化假设之后提出的模型,用它可以推导出位错的应力场及有关弹性参量函数。这个模型对晶体作了如下假设:

1) 完全服从胡克定律,即不存在塑性变形;

2) 是各向同性的;

3) 为连续介质,不存在结构间隙。

显然,这样的假设是不符合晶体实际情况的。因为晶体的质点(原子)不是连续分布的;晶体中也不存在完全没有塑性变形的情况;至于各向异性更是晶体的一个特征。但是对晶体作这样简化之后,推导出的弹性力学函数,除了对位错中心存在严重畸变的区域不适用外,对大部分存在弹性变形的点阵区域都是合适的。

2.1.2 记号与正负

A 应力(Stress)

在实际受力的物体中,应力难于均匀分布,各点的应力状态不同。如要研究某一点的应力状态,可以该点为中心截取一个极小的单元体,在单元体的六个面上都有内应力的作用,见图 2.1。

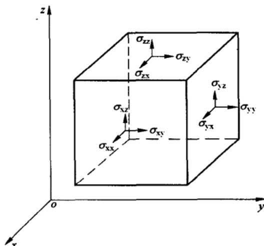


图 2.1 单元体上的应力分量

由于单元体取的极小,可以认为在每个面上内应力是均匀分布的。在一般情况下,每个小平面上作用的内应力都是任意取向的,可以在直角坐标系中分解成方向与 x、y、z 轴平行的三个分量。与之相应,每个小平面上作用三个应力分量,其中一个与小平面垂直,是正应力分量;另两个与其平行,是切应力分量。由于小单元体处于平衡状态,在相对应的两面上作用的内力大小相等而方向相反,各应力分量也大小相等而方向相反。因此,为了表示一点的应力状态需要有九个应力分量(见图 2.1)。其中 $\sigma_{ij}(i,j=x,y,z)$表示在 i 平面上平行于 j 方向的应力分量。σ_{ij}角号相同者为正应力,角号不同者为切应力。例如,σ_{xx}表示正应力,第一个 x 表示应力作用在垂直于 x 轴的面上,第二个 x 表示应力的方向沿 x 轴方向,同理有 σ_{xy}、σ_{xz}、σ_{yy}、σ_{yx}、σ_{yz}、…。

正负号:正面正方向为正,负面负方向为正。

正面负方向为负,负面正方向为负。

由于位错产生的畸变往往具有轴对称性,有时采用圆柱坐标系更为方便。如图 2.2 所示,某一点 M 的直角坐标可用圆柱坐标表示为:

$$x = r\cos\theta,\quad y = r\sin\theta,\quad z = z$$

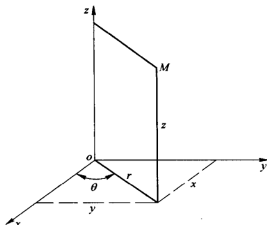


图 2.2　直角坐标和圆柱坐标的关系 θ

反之,圆柱坐标也可用直角坐标表示为:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2},\quad \theta = \arctan\frac{y}{x},\quad z = z$$

同样,在圆柱坐标系中,任意点的应力状态也可用三个正应力分量和三个切应力分量表示,如图 2.3 所示。

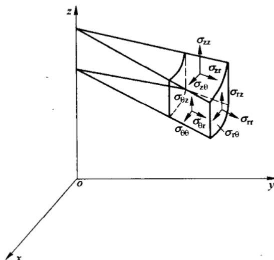


图 2.3　圆柱坐标的正应力和切应力表示法

B 应变(Strain)

线段长度及直角的改变,称为应变。在一般情况下,受力物体中任意点的应变状态也需要用小单元体的应变分量来表征。各线段每单位长度的伸缩,即单位伸缩或相对伸缩,称为正应变,用 ε 表示。

$$\varepsilon=\frac{\text{变化的长度}}{\text{原长}}=\frac{\Delta l}{l}$$

如:ε_{xx}、ε_{yy}、ε_{zz}伸长为正,缩短为负。

各线段直角的改变称为切应变,如 ε_{xy}、ε_{xz}、…。ε_{xy}表示 x 与 y 两方向线段之间直角的改变,直角变小为正,直角变大为负,图 2.4 中的变化为正。

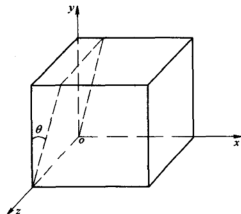


图 2.4 切应变示意图

C 位移(Displacement)

物体内任一点的位移用它在 x、y、z 三轴上的投影 u_x、u_y、u_z 表示。沿坐标轴正向为正,负向为负,这三个投影称为该点的位移分量。

D 泊松比(Poisson's Ratio)

横向应变与纵向应变比值的负值称为泊松比。

$$\nu=-\frac{\text{横向应变}}{\text{纵向应变}}=\frac{\Delta d/d}{\Delta l/l}$$

长度拉长($\Delta l>0$)的同时要变细($\Delta d<0$),所以前边加负号,以使 ν 为正值。

2.1.3 平衡微分方程

为研究物体的平衡问题,取一小的平行六面微分体进行研究,其受力情况见图 2.5。其六个面垂直于各轴,棱边的长度分别为 dx, dy, dz。

一般来说,应力分量是位置坐标的函数,因此,作用在这个微分六面体两对面上的应力分量不完全相同,要发生变化。例如,作用在前后两面上的应力相差$\frac{\partial\sigma_{xx}}{\partial x}dx$,其余类推。另外,物体中还存在体积力(如物体的重力等),将体积力沿坐标轴分解为三个分力 X、Y、Z,作用在微分六面体上的体积力为:$Xdxdydz$, $Ydxdydz$, $Zdxdydz$。

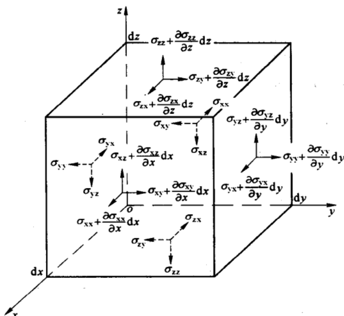


图 2.5　平行六面微分体受力情况

因为六面体是微小的,可以认为作用在这些面上的应力是均匀分布的。处于平衡状态时,六面微分体应满足六个静力平衡方程:

$$\sum M_x = 0 \quad \sum M_y = 0 \quad \sum M_z = 0 \quad \text{力矩平衡}$$

$$\sum F_x = 0 \quad \sum F_y = 0 \quad \sum F_z = 0 \quad \text{力平衡}$$

应用力矩平衡条件,以连接六面体前后两面中心的直线 ab 为力矩轴,这力矩轴与 x 轴平行,于是有 $\sum M_{ab} = 0$,即 $\sum M_x = 0$,说明所有力在 x 方向上的力矩之和为 0。经分析知:平行的力矩为零,只剩下四项,见图 2.6。

$$\left(\sigma_{yz} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y}\mathrm{d}y\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}z\,\frac{\mathrm{d}y}{2} + \sigma_{yz}\mathrm{d}x\mathrm{d}z\,\frac{\mathrm{d}y}{2} - \left(\sigma_{zy} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial z}\mathrm{d}z\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\,\frac{\mathrm{d}z}{2} - \sigma_{zy}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\,\frac{\mathrm{d}z}{2} = 0$$

各项同除以小体积 $\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$,得:

$$\frac{1}{2}\sigma_{yz} + \frac{1}{2}\frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y}\mathrm{d}y + \frac{1}{2}\sigma_{yz} - \frac{1}{2}\sigma_{zy} - \frac{1}{2}\frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial z}\mathrm{d}z - \frac{1}{2}\sigma_{zy} = 0$$

$$\sigma_{yz} - \sigma_{zy} + \frac{1}{2}\frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y}\mathrm{d}y - \frac{1}{2}\frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial z}\mathrm{d}z = 0$$

图 2.6 $\sum M_x = 0$ 时受力情况

其中$\left(\frac{1}{2}\frac{\partial\sigma_{yz}}{\partial y}dy-\frac{1}{2}\frac{\partial\sigma_{zy}}{\partial z}dz\right)$很小略去,所以 $\sigma_{yz}=\sigma_{zy}$。

同理:由 $\sum M_y = 0$ 得:$\sigma_{zx} = \sigma_{xz}$;由 $\sum M_z = 0$ 得:$\sigma_{xy} = \sigma_{yx}$ 。

可得出切应力互等定律:

$$
\begin{aligned}
\sigma_{yz}&=\sigma_{zy}\\
\sigma_{zx}&=\sigma_{xz}\\
\sigma_{xy}&=\sigma_{yx}
\end{aligned}
\tag{2-1}
$$

应用力平衡条件 $\sum F_x = 0$,把所有的力都投影到 x 轴上,其和为零,见图 2.7(只有平行于 x 轴的力才有投影)。

$$
\left(\sigma_{xx}+\frac{\partial\sigma_{xx}}{\partial x}dx\right)dydz-\sigma_{xx}dydz+\left(\sigma_{yx}+\frac{\partial\sigma_{yx}}{\partial y}dy\right)dxdz-\sigma_{yx}dxdz
$$

$$
+\left(\sigma_{zx}+\frac{\partial\sigma_{zx}}{\partial z}dz\right)dxdy-\sigma_{zx}dxdy+Xdxdydz=0
$$

展开得:

$$
\frac{\partial\sigma_{xx}}{\partial x}dxdydz+\frac{\partial\sigma_{yx}}{\partial y}dxdydz+\frac{\partial\sigma_{zx}}{\partial z}dxdydz+Xdxdydz=0
$$

除以 $dxdydz$ 得:

$$
\frac{\partial\sigma_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial\sigma_{yx}}{\partial y}+\frac{\partial\sigma_{zx}}{\partial z}+X=0
$$

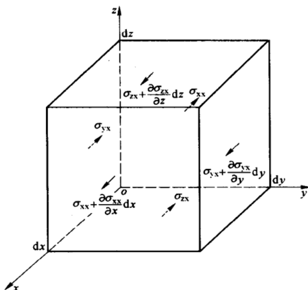


图 2.7 $\sum F_x = 0$ 时受力情况

同理可得另外两个：

$$\frac{\partial\sigma_{yy}}{\partial y}+\frac{\partial\sigma_{zy}}{\partial z}+\frac{\partial\sigma_{xy}}{\partial x}+Y=0$$

$$\frac{\partial\sigma_{zz}}{\partial z}+\frac{\partial\sigma_{zy}}{\partial x}+\frac{\partial\sigma_{yz}}{\partial y}+Z=0$$

由此可得物体处于静止时的平衡微分方程，即纳维叶方程。

$$\begin{aligned}&\frac{\partial\sigma_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial\sigma_{yx}}{\partial y}+\frac{\partial\sigma_{zx}}{\partial z}+X=0\\&\frac{\partial\sigma_{yy}}{\partial y}+\frac{\partial\sigma_{zy}}{\partial z}+\frac{\partial\sigma_{xy}}{\partial x}+Y=0\\&\frac{\partial\sigma_{zz}}{\partial z}+\frac{\partial\sigma_{xz}}{\partial x}+\frac{\partial\sigma_{yz}}{\partial y}+Z=0\end{aligned}\tag{2-2}$$

如果物体内质点处于运动状态，则式(2-2)≠0，还必须考虑惯性力(Inertial Force)。根据牛顿第二运动定律：$F=ma$，这个惯性力等于六面微分体的质量 $\rho\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$ 与其加速度在坐标轴上投影的乘积。用 u_x、u_y、u_z 分别表示晶体中任一点在 x、y、z 轴方向上的位移分量，则沿各轴方向的加速度为：$\frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2}$，$\frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2}$，$\frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2}$。

在惯性力作用下，平衡时的微分方程为：

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y}+\frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial z}+X=\rho\frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2}$$
$$\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y}+\frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial z}+\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x}+Y=\rho\frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} \quad (2\text{-}3)$$
$$\frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z}+\frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial x}+\frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y}+Z=\rho\frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2}$$

2.1.4 应变与位移的关系

材料变形时,其中某一点 $P(x,y,z)$移动到点 $P'(x',y',z')$,见图 2.8。

$P\rightarrow P'$点:

$x'=x+u_x$, $y'=y+u_y$,

$z'=z+u_z$

u_x、u_y、u_z为在三个坐标轴上的位移分量。位移是坐标的函数,因变形在很小范围内即在弹性范围内,这种函数关系呈线性,但有多个系数 e_{ij},这种关系如下:

$$u_x=e_{xx}x+e_{xy}y+e_{xz}z$$
$$u_y=e_{yx}x+e_{yy}y+e_{yz}z \quad (2\text{-}4)$$
$$u_z=e_{zx}x+e_{zy}y+e_{zz}z$$

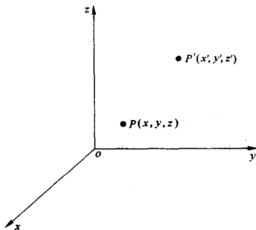


图 2.8 位移示意图

现在讨论式中 e_{ij}。把它看成平面问题,假设有一小块材料由原状态 ABCD 变为变形后的状态 A'B'C'D',见图 2.9。

由 A 移到A',分量为 u_x、u_y,用(2-4)式中的前两个方程,并对其进行偏微分得:

$$\frac{\partial u_x}{\partial x}=e_{xx},\quad \frac{\partial u_y}{\partial y}=e_{yy},\quad \frac{\partial u_x}{\partial y}=e_{xy},\quad \frac{\partial u_y}{\partial x}=e_{yx}。$$

因为

$$\frac{\text{变化了的长度}}{\text{原长}}=\text{正应变}$$

所以图 2.9 中 ABCD→A'B'C'D'后,沿着 x 轴正向的正应变为:

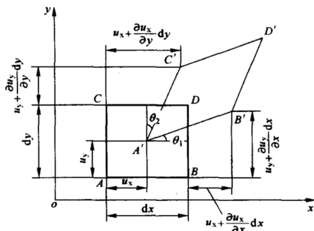


图 2.9　一小块材料产生小的变形后的平面变化

$$\frac{(A'B')_x - AB}{AB} = \frac{\left(dx - u_x + u_x + \frac{\partial u_x}{\partial x}dx\right) - dx}{dx} = \frac{\partial u_x}{\partial x} = e_{xx}$$

这里$(A'B')_x$为$A'B'$在X轴上的投影。

同理:沿 y 轴正向的正应变为:

$$\frac{(A'C')_y - AC}{AC} = \frac{\left(dy - u_y + u_y + \frac{\partial u_y}{\partial y}dy\right) - dy}{dy} = \frac{\partial u_y}{\partial y} = e_{yy}$$

由平面推到三维,正应变与位移有如下关系式:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \frac{\partial u_x}{\partial x} = e_{xx} \\ \varepsilon_{yy} &= \frac{\partial u_y}{\partial y} = e_{yy} \\ \varepsilon_{zz} &= \frac{\partial u_z}{\partial z} = e_{zz} \end{aligned} \tag{2-5}$$

变形后不仅有伸长和缩短这种正应变,而且角度也会改变,其角度改变量称为角应变或切应变,工程上定义:工程切应变=正交轴的角度改变之和$(\theta_1+\theta_2)$,用 γ 表示。

AB 与 AC 夹角为$\frac{\pi}{2}$,$A'B'$与$A'C'$夹角改变了 γ。

$$\gamma = \theta_1 + \theta_2 \approx \tan\theta_1 + \tan\theta_2$$

$$\tan\theta_2=\frac{u_x+\frac{\partial u_x}{\partial y}dy-u_x}{u_y+\frac{\partial u_y}{\partial y}dy+dy-u_y}=\frac{\frac{\partial u_x}{\partial y}dy}{\frac{\partial u_y}{\partial y}dy+dy}=\frac{\frac{\partial u_x}{\partial y}}{1+\frac{\partial u_y}{\partial y}}=\frac{\partial u_x}{\partial y}=e_{xy}\approx\theta_2$$

$\left(\frac{\partial u_y}{\partial y}\text{与 1 比较是很小的,可忽略不计。}\right)$

同理：

$$\tan\theta_1\approx\theta_1=\frac{\partial u_y}{\partial x}=e_{yx}$$

所以,工程切应变 $\gamma=\theta_1+\theta_2=e_{xy}+e_{yx}=\frac{\partial u_x}{\partial y}+\frac{\partial u_y}{\partial x}$

在三维情况下,角应变与位移有如下关系式：

$$\begin{aligned}\gamma_{xy}&=\frac{\partial u_x}{\partial y}+\frac{\partial u_y}{\partial x}=e_{xy}+e_{yx}\\ \gamma_{yz}&=\frac{\partial u_y}{\partial z}+\frac{\partial u_z}{\partial y}=e_{yz}+e_{zy}\\ \gamma_{zx}&=\frac{\partial u_z}{\partial x}+\frac{\partial u_x}{\partial z}=e_{zx}+e_{xz}\end{aligned}\tag{2-6}$$

应变与位移关系如下：

正应变：

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx}&=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_x}{\partial x}\right)=\frac{\partial u_x}{\partial x}=e_{xx}\\ \varepsilon_{yy}&=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_y}{\partial y}+\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)=\frac{\partial u_y}{\partial y}=e_{yy}\\ \varepsilon_{zz}&=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_z}{\partial z}+\frac{\partial u_z}{\partial z}\right)=\frac{\partial u_z}{\partial z}=e_{zz}\end{aligned}\tag{2-7}$$

切应变：

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xy}&=\varepsilon_{yx}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial y}+\frac{\partial u_y}{\partial x}\right)=\frac{1}{2}(e_{xy}+e_{yx})\\ \varepsilon_{yz}&=\varepsilon_{zy}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_z}{\partial y}+\frac{\partial u_y}{\partial z}\right)=\frac{1}{2}(e_{yz}+e_{zy})\\ \varepsilon_{zx}&=\varepsilon_{zx}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_z}{\partial x}+\frac{\partial u_x}{\partial z}\right)=\frac{1}{2}(e_{zx}+e_{xz})\end{aligned}\tag{2-8}$$

故：ε_{xy}、ε_{zy}、ε_{xz}是各自平面里的角改变量的$\frac{1}{2}$,称为切应变,并且 $\varepsilon_{xy}=\varepsilon_{yx}$,$\varepsilon_{zy}=\varepsilon_{yz}$,$\varepsilon_{xz}=\varepsilon_{zx}$,即切应变分量是对称的。

2.1.5 应力与应变的关系

设弹性体为均匀各向同性,当 $\sigma<\sigma_e$ 时,符合胡克(Hooke)定律：

用 σ 表示 ε：

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_{xx} &= \frac{1}{E}[\sigma_{xx} - \nu(\sigma_{yy} + \sigma_{zz})] \\
\varepsilon_{yy} &= \frac{1}{E}[\sigma_{yy} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{zz})] \\
\varepsilon_{zz} &= \frac{1}{E}[\sigma_{zz} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})] \\
\varepsilon_{xy} &= \frac{1}{2\mu}\sigma_{xy} \\
\varepsilon_{xz} &= \frac{1}{2\mu}\sigma_{xz} \\
\varepsilon_{yz} &= \frac{1}{2\mu}\sigma_{yz}
\end{aligned} \tag{2-9}
$$

用 ε 表示 σ：

$$
\begin{aligned}
\sigma_{xx} &= \lambda(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + 2\mu\varepsilon_{xx} \\
\sigma_{yy} &= \lambda(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + 2\mu\varepsilon_{yy} \\
\sigma_{zz} &= \lambda(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + 2\mu\varepsilon_{zz} \\
\sigma_{xy} &= 2\mu\varepsilon_{xy} \\
\sigma_{xz} &= 2\mu\varepsilon_{xz} \\
\sigma_{yz} &= 2\mu\varepsilon_{yz}
\end{aligned} \tag{2-10}
$$

式中　E——弹性模量；

μ——切变模量；

ν——泊松比。

$$
\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}
$$

$$
\lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} = \frac{2\mu\nu}{(1-2\nu)} \tag{2-11}
$$

2.1.6　用位移分量表示平衡方程

在静力平衡条件下，不考虑体积力时，由式(2-2)可得：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial\sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial\sigma_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial\sigma_{zx}}{\partial z} &= 0 \\
\frac{\partial\sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial\sigma_{zy}}{\partial z} + \frac{\partial\sigma_{xy}}{\partial x} &= 0
\end{aligned} \tag{2-12}
$$

$$\frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z}+\frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial x}+\frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y}=0$$

将式(2-10)代入式(2-12)中第一式得：

$$\frac{\partial}{\partial x}[2\mu\varepsilon_{xx}+\lambda(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}+\varepsilon_{zz})]+\frac{\partial}{\partial y}(2\mu\varepsilon_{xy})+\frac{\partial}{\partial z}(2\mu\varepsilon_{xz})=0$$

令 $\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}+\varepsilon_{zz}=\theta$，并将(2-7)和(2-8)式代入得：

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[2\mu\frac{\partial u_x}{\partial x}+\lambda\theta\right]+\frac{\partial}{\partial y}\left[2\mu\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial y}+\frac{\partial u_y}{\partial x}\right)\right]+$$

$$\frac{\partial}{\partial z}\left[2\mu\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial z}+\frac{\partial u_z}{\partial x}\right)\right]=0$$

$$2\mu\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2}+\frac{\partial}{\partial x}\lambda\theta+\mu\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2}+\mu\frac{\partial^2 u_y}{\partial y\partial x}+\mu\frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2}+\mu\frac{\partial^2 u_z}{\partial z\partial x}=0$$

$$\mu\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)u_x+\frac{\partial}{\partial x}\lambda\theta+\mu\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}+\frac{\partial u_z}{\partial z}\right)=0$$

$$\Downarrow$$

$$\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}+\varepsilon_{zz}=\theta$$

引入哈密尔顿算子∇： $\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$

$$\mu\nabla^2 u_x+\frac{\partial}{\partial x}\lambda\theta+\mu\frac{\partial}{\partial x}\theta=0$$

$$\mu\nabla^2 u_x+(\lambda+\mu)\frac{\partial}{\partial x}\theta=0$$

将 $\lambda=\frac{2\mu\nu}{1-2\nu}$ 代入上式得：

$$\nabla^2 u_x+\frac{1}{1-2\nu}\frac{\partial}{\partial x}\theta=0$$

同理可得另外两式，最终有用位移分量表示的平衡方程为：

$$\nabla^2 u_x+\frac{1}{1-2\nu}\frac{\partial}{\partial x}\theta=0$$

$$\nabla^2 u_y+\frac{1}{1-2\nu}\frac{\partial}{\partial y}\theta=0$$

$$\nabla^2 u_z+\frac{1}{1-2\nu}\frac{\partial}{\partial z}\theta=0 \tag{2-13}$$

其中：$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$，$\theta=\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}+\varepsilon_{zz}$。

2.2　直刃型位错的应力场(Stress Field of a Straight Edge Dislocation)

由于位错的存在使晶体发生畸变，所以在位错的中心周围形成应力场。位错的很多性质都与位错的应力场有关。要准确地对晶体中位错周围的弹性应力场进行定量计算，是复杂而困难的。为简化起见，通常可采用弹性连续介质模型来进行计算。该模型首先假设晶体是完全弹性体，服从胡克定律；其次，把晶体看成是各向同性的；第三，近似地认为晶体内部由连续介质构成，晶体中没有空隙，因此晶体中的应力、应变、位移等量是连续的，可用连续函数表示。

2.2.1　应力场模型(Stress Field Mode)

刃型位错的连续弹性介质模型如图 2.10 所示。在半径为 R 的弹性圆柱体中心挖一个半径为 r_0 的小孔，沿着轴线方向将其一半切开，使切面两侧沿径向(x 轴方向)相对位移一个 b 的距离，然后胶合起来，就形成了一个刃型位错应力场。

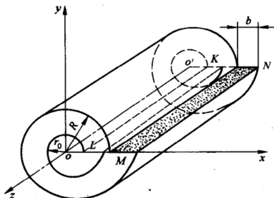


图 2.10　刃型位错的连续介质模型

2.2.2　应力场的数学表达式

对刃型位错(见图 2.10)，位移在 z 轴方向上的分量 $u_z=0$，而且其他两个位移分量不随 z 轴变化，即：$\frac{\partial u_x}{\partial z}=0, \frac{\partial u_y}{\partial z}=0$。这样刃型位错应力场可看成是平面应变问题(可利用弹性力学公式)。

A 求双调和方程$\nabla^4\chi=0$

$$\nabla^4\chi=\nabla^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\chi \tag{2-14}$$

由式(2-7)、式(2-8),得应变连续方程:

$$\varepsilon_{xx}=\frac{\partial u_x}{\partial x}$$

$$\varepsilon_{yy}=\frac{\partial u_y}{\partial y}$$

$$\varepsilon_{xy}=\varepsilon_{yx}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial y}+\frac{\partial u_y}{\partial x}\right) \tag{2-15}$$

其他应变均为0。

由式(2-10),得应力方程:

$$\sigma_{xx}=\lambda(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy})+2\mu\varepsilon_{xx}$$

$$\sigma_{yy}=\lambda(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy})+2\mu\varepsilon_{yy}$$

$$\sigma_{zz}=\lambda(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy})$$

$$\sigma_{xy}=2\mu\varepsilon_{xy} \tag{2-16}$$

其他应力均为0。

式(2-16)中前两式相加得:

$$\sigma_{xx}+\sigma_{yy}=2(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy})(\lambda+\mu) \tag{2-17}$$

两边都作用一个∇^2

$$\nabla^2(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})=2(\lambda+\mu)\nabla^2(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}) \tag{2-18}$$

很容易证明式(2-18)=0。

因为式(2-12)是平面问题,简化后可得:

$$\frac{\partial\sigma_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial\sigma_{yx}}{\partial y}=0 \tag{2-19}$$

$$\frac{\partial\sigma_{yy}}{\partial y}+\frac{\partial\sigma_{xy}}{\partial x}=0 \tag{2-20}$$

式(2-19)、式(2-20)分别对x、y求偏微分:

$$\frac{\partial^2\sigma_{xx}}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\sigma_{yx}}{\partial x\partial y}=0$$

$$\frac{\partial^2\sigma_{yy}}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\sigma_{xy}}{\partial x\partial y}=0$$

相加：
$$\frac{\partial^2\sigma_{xx}}{\partial x^2}+2\frac{\partial^2\sigma_{xy}}{\partial x\partial y}+\frac{\partial^2\sigma_{yy}}{\partial y^2}=0 \tag{2-21}$$

将式(2-16)代入式(2-21)得：
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}[\lambda(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy})+2\mu\varepsilon_{xx}]+2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}(2\mu\varepsilon_{xy})+\frac{\partial^2}{\partial y^2}[\lambda(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy})+2\mu\varepsilon_{yy}]=0 \tag{2-22}$$

将式(2-15)代入式(2-22)得：
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\lambda\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)+2\mu\frac{\partial u_x}{\partial x}\right]+2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}\left[2\mu\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial y}+\frac{\partial u_y}{\partial x}\right)\right]+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\left[\lambda\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)+2\mu\frac{\partial u_y}{\partial y}\right]=0$$

$$\lambda\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)+2\mu\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}\right)+2\mu\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}\left(\frac{\partial u_x}{\partial y}\right)+2\mu\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}\left(\frac{\partial u_y}{\partial x}\right)+\lambda\frac{\partial^2}{\partial y^2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)+2\mu\frac{\partial^2}{\partial y^2}\left(\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)=0$$

$$\lambda\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)+2\mu\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)+2\mu\frac{\partial^2}{\partial y^2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)=0$$

$$\lambda\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)+2\mu\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)=0$$

$$(\lambda+2\mu)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)=0$$

所以
$$\lambda+2\mu\neq 0$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)=0$$

$$\nabla^2\left(\frac{\partial u_x}{\partial x}+\frac{\partial u_y}{\partial y}\right)=\nabla^2(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy})=0$$

又因
$$\nabla^2(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})=2(\lambda+\mu)\nabla^2(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy})=0$$

所以
$$\nabla^2(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})=0 \tag{2-23}$$

引入应力函数$\chi(x,y)$，并将各应力分量表示为χ的二阶偏微商，使函数满足下式：

$$\sigma_{xx}=\frac{\partial^2\chi}{\partial y^2},\quad \sigma_{yy}=\frac{\partial^2\chi}{\partial x^2},\quad \sigma_{xy}=\frac{\partial^2\chi}{\partial x\partial y} \tag{2-24}$$

将式(2-24)代入式(2-23)：

$$\nabla^4\left(\frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2}\right)=0$$

$$\nabla^2\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\chi=0$$

所以$\nabla^4\chi=0$ 为双调和方程。

B 求$\nabla^4\chi=0$ 的解

求解过程略，适于刃型位错的解只有一个为：

$$\chi=Dr\sin\theta\ln r \qquad D \text{ 为常数}$$

换成直角标：

$$\chi=Dy\ln(x^2+y^2)^{1/2} \tag{2-25}$$

将式(2-25)代入式(2-24)得：

$$\frac{\partial \chi}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{1}{2}Dy\ln(x^2+y^2)\right]$$

$$=\frac{1}{2}D\ln(x^2+y^2)+\frac{1}{2}Dy\frac{2y}{x^2+y^2}$$

$$=\frac{1}{2}D\ln(x^2+y^2)+D\frac{y^2}{x^2+y^2}$$

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2}=\frac{1}{2}D\frac{2y}{x^2+y^2}+D\frac{2y(x^2+y^2)-2y^2y}{(x^2+y^2)}$$

$$=D\frac{y}{x^2+y^2}+D\frac{2x^2y}{(x^2+y^2)^2}$$

$$=D\frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2}$$

$$=\sigma_{xx}$$

同理

$$\sigma_{yy}=D\frac{y(y^2-x^2)}{(x^2+y^2)^2}$$

$$\sigma_{xy}=D\frac{x(y^2-x^2)}{(x^2+y^2)^2}$$

因为是平面问题，$\varepsilon_{zz}=0$，由式(2-9)得：

$$\varepsilon_{zz}=\frac{1}{E}[\sigma_{zz}-\nu(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})]=0$$

因为

$$\frac{1}{E}\neq0$$

所以

$$\sigma_{zz}-\nu(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})=0$$

$$\sigma_{zz}=\nu(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})$$

故：

$$\sigma_{xx}=D\frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2}$$
$$\sigma_{yy}=D\frac{y(y^2-x^2)}{(x^2+y^2)^2}$$
$$\sigma_{xy}=D\frac{x(y^2-x^2)}{(x^2+y^2)^2}$$
$$\sigma_{zz}=\nu(\sigma_{xx}+\sigma_{yy}) \tag{2-26}$$

C 求常数 D

由式(2-9)：

$$\varepsilon_{xx}=\frac{1}{E}[\sigma_{xx}-\nu(\sigma_{yy}+\sigma_{zz})]$$
$$=\frac{1}{E}[\sigma_{xx}(1-\nu^2)-\nu(1+\nu)\sigma_{yy}]$$

将 $\mu=\dfrac{E}{2(1+\nu)}$ 即 $E=2\mu(1+\nu)$ 代入,则

$$\varepsilon_{xx}=\frac{1}{2\mu(1+\nu)}[\sigma_{xx}(1-\nu)(1+\nu)-\nu(1+\nu)\sigma_{yy}]$$
$$=\frac{1}{2\mu}\left[(1-\nu)\frac{Dy(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2}-\nu\frac{Dy(y^2-x^2)}{(x^2+y^2)^2}\right]$$

展开再合并得：

$$\varepsilon_{xx}=\frac{D}{2\mu}\left[\frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2}-\nu\frac{2y}{x^2+y^2}\right]$$

因为 $\varepsilon_{xx}=\dfrac{\partial u_x}{\partial x}$,所以：

$$u_x=\int\varepsilon_{xx}\mathrm{d}x=\frac{D}{2\mu}\left[\int\frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2}\mathrm{d}x-\nu\int\frac{2y}{x^2+y^2}\mathrm{d}x\right]$$
$$=\frac{D}{2\mu}\int\left[\frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2}-\nu\frac{2y}{x^2+y^2}-\frac{2y}{x^2+y^2}+\frac{2y}{x^2+y^2}\right]\mathrm{d}x$$
$$=\frac{D}{2\mu}\int\left[\frac{y(3x^2+y^2)-2y(x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2}-2(\nu-1)\frac{y}{x^2+y^2}\right]\mathrm{d}x$$
$$=\frac{D}{2\mu}\int\frac{y(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2}\mathrm{d}x-\frac{(\nu-1)D}{\mu}\int\frac{y}{x^2+y^2}\mathrm{d}x$$
$$=-\frac{D}{2\mu}\frac{xy}{x^2+y^2}+\frac{(\nu-1)D}{\mu}\arctan\frac{y}{x}$$

换成极坐标：

$$u_x = -\frac{D}{2\mu}\frac{r\cos\theta r\sin\theta}{r^2} + \frac{(\nu-1)D}{\mu}\theta$$

$$= -\frac{D}{\mu}\left[\frac{\sin 2\theta}{4} + (1-\nu)\theta\right]$$

边界条件为：当 $\theta=0$ 时，$u_x=0$；当 $\theta=2\pi$ 时，$u_x=b$。

所以

$$u_x = -\frac{D}{\mu}[0+(1-\nu)2\pi] = b$$

$$D = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}$$

代入式(2-26)得：

$$\sigma_{xx} = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2}$$

$$\sigma_{yy} = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{y(y^2-x^2)}{(x^2+y^2)^2}$$

$$\sigma_{xy} = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{x(y^2-x^2)}{(x^2+y^2)^2}$$

$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_{zx} = \sigma_{yz} = \sigma_{zy} = 0 \tag{2-27}$$

为刃型位错的应力场公式。

若用圆柱坐标表示其应力分量为

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{\sin\theta}{r}$$

$$\sigma_{zz} = -\nu(\sigma_{rr}+\sigma_{\theta\theta}) \tag{2-28}$$

$$\sigma_{r\theta} = \sigma_{\theta r} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{\cos\theta}{r}$$

$$\sigma_{rz} = \sigma_{zr} = \sigma_{\theta z} = \sigma_{z\theta} = 0$$

式中 μ——切变模量；

ν——泊松比；

b——柏氏矢量。

注意：在 $< r_0$ 区域，$r\to 0$ 时，$\sigma\to\infty$，显然与实际情况不符，这说明式(2-27)、式(2-28)只适用于远程应力场，而不适用于位错中心的严重畸变区。

2.2.3　应力场的特点(Characteristics of The Stress Field)

应力场有如下特点：

1) 同时存在正应力分量与切应力分量，而且各应力分量的大小与 μ 和 b 成正比，与 r 成反比，即随着与位错距离的增大，应力的绝对值减小。

2) 各应力分量都是 x, y 的函数，而与 z 无关。这表明在平行于位错线的直线上，任一点的应力均相同。

3) 刃型位错的应力场对称于多余半原子面($y-z$ 面)，即对称于 y 轴。

4) $y=0$ 时，$\sigma_{xx}=\sigma_{yy}=\sigma_{zz}=0$，说明在滑移面上，没有正应力，只有切应力，而且切应力 σ_{xy} 达到极大值。

5) $y>0$ 时，$\sigma_{xx}<0$；而 $y<0$ 时，$\sigma_{xx}>0$。这说明正刃型位错的滑移面上侧为压应力，滑移面下侧为张应力。

6) 在应力场的任意位置处，$|\sigma_{xx}|>|\sigma_{yy}|$。

7) $x=\pm y$ 时，σ_{yy}，σ_{xy} 均为零，说明在直角坐标的两条对角线处，只有 σ_{xx}，而且在每条对角线的两侧，$\sigma_{xy}(\sigma_{yx})$ 及 σ_{yy} 的符号相反。

图 2.11 显示了刃型位错周围的应力分布情况。

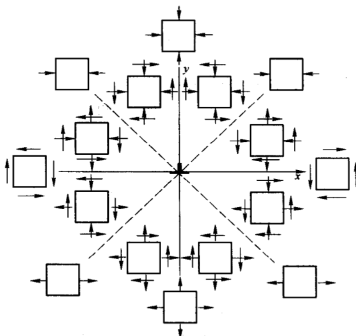


图 2.11　刃型位错各应力分量符号与位置的关系

2.3 螺型位错的应力场(Stress Field of The Screw Dislocation)

螺型位错的连续介质弹性切变模型如图 2.12 所示。在半径为 R 的弹性圆柱体中心挖一个半径为 r_0 的小孔，沿 xoz 面切开，使两个切开面沿 z 方向作相对位移 b，再把这两个面粘合起来，就形成了一个螺型位错应力场。

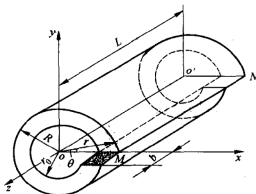


图 2.12 螺型位错的连续介质模型

此时，$u_x = u_y = 0$，$u_z \neq 0$。即对螺型位错，没有正应力，只有切应力。因螺型位错无多余的半原子面，无体积变化，即 $\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} = 0$。

由式(2-13)，用位移分量表示平衡微分方程：

$$\nabla^2 u_x + \frac{1}{1-2\nu}\frac{\partial\theta}{\partial x} = 0$$

$$\nabla^2 u_y + \frac{1}{1-2\nu}\frac{\partial\theta}{\partial y} = 0$$

$$\nabla^2 u_z + \frac{1}{1-2\nu}\frac{\partial\theta}{\partial z} = 0$$

式中，$\theta = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$，

因为螺型位错的 $\theta = 0$，所以平衡微分方程简化为：

$$\nabla^2 u_z = 0$$

位错所满足的位移条件为：$(u_z)_{\theta=2\pi} - (u_z)_{\theta=0} = b$，所以 $\nabla^2 u_z = 0$ 的解为：

$$u_z = \frac{b}{2\pi}\theta$$

从图 2.12 可知：$\tan\theta=\frac{y}{x}$，则 $\theta=\arctan\frac{y}{x}$代入上式

$$u_z=\frac{b}{2\pi}\arctan\frac{y}{x}$$

由式(2-10)知：σ_{xx}、σ_{yy}、σ_{zz}、σ_{xy}均为零，只有 σ_{zx}、σ_{zy}不为零。

由式(2-9)和式(2-10)得：

$$\sigma_{xz}=2\mu\varepsilon_{xz}=2\mu\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_x}{\partial z}+\frac{\partial u_z}{\partial x}\right)=\mu\frac{\partial u_z}{\partial x}$$

$$=\mu\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{b}{2\pi}\arctan\frac{y}{x}\right)=-\frac{\mu b}{2\pi}\frac{y}{x^2+y^2}$$

同理可得：
$$\sigma_{yz}=\frac{\mu b}{2\pi}\frac{x}{x^2+y^2}$$

所以螺型位错的应力场公式为：

$$\sigma_{xz}=\sigma_{zx}=-\frac{\mu b}{2\pi}\frac{y}{x^2+y^2}$$

$$\sigma_{yz}=\sigma_{zy}=\frac{\mu b}{2\pi}\frac{x}{x^2+y^2}$$

$$\sigma_{xx}=\sigma_{yy}=\sigma_{zz}=\sigma_{xy}=\sigma_{yx}=0 \tag{2-29}$$

若用柱坐标表示为：
$$\sigma_{\theta z}=\sigma_{z\theta}=\frac{\mu b}{2\pi}\frac{1}{r}$$

与刃型位错相同，此式也不适用于位错中心区，因 $r\to0$ 时，$\sigma\to\infty$。

应变分量为：

$$\varepsilon_{xz}=\frac{\sigma_{xz}}{2\mu}=-\frac{b}{4\pi}\frac{y}{x^2+y^2}$$

$$\varepsilon_{yz}=\frac{\sigma_{yz}}{2\mu}=\frac{b}{4\pi}\frac{x}{x^2+y^2}$$

螺型位错应力场的特点如下：

1）只有切应力分量，正应力分量全为零，这表明螺型位错不引起晶体的膨胀和收缩。

2）螺型位错所产生的切应力分量只与 r 有关(成反比)，而与 θ，z 无关。只要 r 一定，$\sigma_{\theta z}$就为常数。因此，螺型位错的应力场是轴对称的，即与位错等距离的各处，其切应力值相等，并随着与位错距离的增大，应力值减小。

2.4 位错的应变能(Strian Energy of The Dislocation)

晶体中，位错周围点阵畸变引起弹性应力场导致能量增高，这部分能

量称为位错的应变能，或称为位错的能量。位错的能量可分为两部分：位错中心畸变能和位错应力场引起的弹性应变能。位错中心区域由于点阵畸变很大，不能用胡克定律，而需借助于点阵模型直接考虑晶体结构和原子间的相互作用。据估算，这部分能量大约为总应变能的$\frac{1}{10}\sim\frac{1}{15}$左右，故常予以忽略，而以中心区域以外的弹性应变能代表位错的应变能。此项能量可采用连续介质模型根据单位长度位错所作的功求得。

2.4.1 刃型位错的应变能

假定图 2.10 所示的刃型位错为一单位长度的位错。由于在造成这个位错的过程中沿滑移方向的位移是从 0 逐渐增加到 b 的，因而位移是个变量，同时滑移面 MN 上所受的力也随着 r 而变化。故在位移过程中，当位移为 $\alpha b(\alpha<1)$，α 由 0→1 就是位错形成过程，此时，柏氏矢量为 αb。

用极坐标表示位错的应力场：

$$\sigma_{rr}=D\frac{\sin\theta}{r}\quad(\text{径向力})$$

$$\sigma_{\theta\theta}=D\frac{\sin\theta}{r}\quad(\text{周向力})$$

$$\sigma_{r\theta}=-D\frac{\cos\theta}{r}\quad(\text{切向力})$$

式中，$D=-\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}$。

距中心轴线 r 处的切应力，根据上式，在 $\theta=0$ 时，只有

$$\sigma_{r\theta}=-D\frac{1}{r}=\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\cdot\frac{1}{r}$$

将 $b=\alpha b$ 代入：

$$\sigma_{r\theta}=\frac{\mu(\alpha b)}{2\pi(1-\nu)}\frac{1}{r}$$

单位长度刃型位错，移动 $\mathrm{d}(\alpha b)$ 所作的功为：

$$\mathrm{d}w=\frac{\mu(\alpha b)}{2\pi(1-\nu)}\cdot\frac{1}{r}\cdot\mathrm{d}r\cdot1\cdot\mathrm{d}(\alpha b)$$

$$=\frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)}\frac{\alpha}{r}\mathrm{d}\alpha\mathrm{d}r$$

当 α 从 0→1；r 从 r_0→R 时，单位长度刃型位错的能量为：

$$
\begin{aligned}
W_{刃} &= \int_{r_0}^{R}\int_{0}^{1} \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)}\ \frac{\alpha}{r}\mathrm{d}\alpha\mathrm{d}r \\
&= \int_{r_0}^{R} \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)}\ \frac{1}{r}\ \frac{1}{2}\mid\alpha^2\mid_1^0\mathrm{d}r \\
&= \int_{r_0}^{R} \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)}\ \frac{1}{r}\mathrm{d}r = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)}\mid\ln r\mid_{r_0}^{R} \\
&= \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)}\ln\frac{R}{r_0}
\end{aligned}
\tag{2-30}
$$

2.4.2　螺型位错的应变能

同上:力为:$\sigma_{\theta z}=\frac{\mu(\alpha b)}{2\pi}\frac{1}{r}$,则单位长度螺型位错的能量为:

$$
\begin{aligned}
W_{螺} &= \int_{r_0}^{R}\int_{0}^{1}\frac{\mu(\alpha b)}{2\pi}\ \frac{1}{r}\cdot\mathrm{d}r\cdot 1\cdot\mathrm{d}(\alpha b) \\
&= \int_{r_0}^{R}\frac{\mu b^2}{4\pi}\ \frac{1}{r}\mathrm{d}r = \frac{\mu b^2}{4\pi}\ln r\mid_{r_0}^{R} \\
&= \frac{\mu b^2}{4\pi}\ln\frac{R}{r_0}
\end{aligned}
\tag{2-31}
$$

2.4.3　混合型位错的应变能

混合型位错可分解为一个柏氏矢量为 $b\sin\theta$ 的刃型位错分量和一个柏氏矢量为 $b\cos\theta$ 的螺型位错分量。由于互相垂直的刃型位错和螺型位错之间没有相同的应力分量,它们之间没有相互作用能。因此,分别算出这两个位错分量的应变能,它们的和就是混合型位错的应变能,即

$$
\begin{aligned}
W_{混} = W_{刃} + W_{螺} &= \frac{\mu b^2\sin^2\theta}{4\pi(1-\nu)}\ln\frac{R}{r_0} + \frac{\mu b^2\cos^2\theta}{4\pi}\ln\frac{R}{r_0} \\
&= \frac{\mu b^2}{4\pi}\left(\frac{\sin^2\theta}{1-\nu}+\cos^2\theta\right)\ln\frac{R}{r_0}
\end{aligned}
$$

为了便于与刃型、螺型位错比较,设$\frac{1}{k}=\frac{\sin^2\theta}{1-\nu}+\cos^2\theta$

$$
W_{混} = \frac{\mu b^2}{4\pi k}\ln\frac{R}{r_0} \tag{2-32}
$$

实际上,所有直位错的能量均可用上式表达。显然,对螺型位错 $k=1$;

刃型位错 $k=1-\nu$;而对混合型位错则 $k=\frac{1-\nu}{1-\nu\cos^2\theta}$。由此可见,位错应变能的大小与 r_0和 R 有关。一般认为 r_0 与 b 值相近,约为 10^{-10} m,而 R 为位错应力场最大作用范围的半径。实际晶体中由于存在亚结构(Substructure)或位错网络,一般取 $R\approx10^{-6}$ m。因此,单位长度位错的总应变能可简化为:

$$W=\alpha\mu b^2$$

式中,α 为与几何因素(位错类型,位错密度(Dislocation Density))有关的一个系数,其值在 0.5~1.0 之间。

2.4.4 结论(Conclusion)

关于位错的应变能,可概括为以下几点:

1) 位错的能量包括两部分:位错中心区的能量小于总能量的$\frac{1}{10}$,常可忽略;而位错的弹性应变能正比于 $\ln\frac{R}{r_0}$,它随 r 缓慢地增加,所以位错具有长程应力场。

2) 位错的应变能与 b^2 成正比。因此,从能量的观点来看,晶体中具有最小 b 的位错应该是最稳定的,而 b 大的位错有可能分解为 b 小的位错,以降低系统的能量。

3) $\frac{W_{螺}}{W_{刃}}=(1-\nu)$,常用金属材料的 ν 约为$\frac{1}{3}$,故螺型位错的弹性应变能约为刃型位错的 2/3。也就是说螺型位错比刃型位错易形成。

4) 位错的能量是以单位长度的能量来定义的,故位错的能量还与位错线的形状有关,由于两点间以直线为最短,所以直线位错的应变能小于弯曲位错的应变能,即直线位错更稳定,因此,位错线有尽量变直和缩短其长度的趋势。

5) 位错的存在均会使系统的内能升高,虽然位错的存在也会引起晶体中熵(Entropy)值的增加,但相对来说,熵值增加是有限的,可以忽略不计。因此,位错的存在使晶体处于高能的不稳定状态,可见位错是热力学上不稳定的晶体缺陷。

2.5 位错的线张力(Line Tension of Dislocation)

位错的应变能与位错线的长度成正比,为了降低应变能,位错线有力

求缩短的趋势，故在位错线上存在一种使其变直的线张力 T。线张力是一种组态力，类似于液体的表面张力，可定义为：当位错线的长度增加一无限小量，其能量增加与长度增量的比值就等于线张力 T，即

$$T=\frac{\Delta W}{\Delta L}$$

所以位错的线张力在数值上等于单位长度位错线的能量，并且与位错线的具体形状有关。

2.5.1　直线位错

对直线位错，单位长度位错的能量为：

$$W=\frac{\mu b^2}{4\pi k}\ln\frac{R}{r_0}$$

式中，k 由位错性质确定，对刃型位错 $k=1-\nu$；对螺型位错 $k=1$；对混合型位错 $k=\frac{1-\nu}{1-\nu\cos^2\theta}$。由此可见，直线位错能量的大小只与 r_0 和 R 有关。

当 $r_0\to b(10^{-8}\ \text{cm})$，$R$（相当于亚晶粒长度）$\approx 10^{-4}$ cm 时，$\frac{R}{r_0}=10^4$，则直线位错的线张力为：

$$T\approx\mu b^2$$

2.5.2　弯曲位错(Curved Dislocation)

如图 2.13 所示，假设将一根位错线弯成波浪形，波长为 λ，使位错线的长度由直线时的 l 变为 $l+\Delta l$。可将弯曲后位错的应力场分成远程（$r>\lambda$）和近程（$r<\lambda$）两部分。

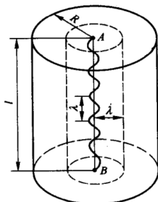


图 2.13　波浪形位错的线张力

在 $r>\lambda$ 的区域，应力场会相互抵消一部分，使这个区域的总能量为：

$$W_1=\frac{\mu b^2 l}{4\pi k}\ln\frac{R}{\lambda}$$

在 $r<\lambda$ 的区域，位错线的能量和长为 $l+\Delta l$ 的直位错线相近，其能量为：

$$W_2=\frac{\mu b^2}{4\pi k}(l+\Delta l)\ln\frac{\lambda}{r_0}$$

又因未弯曲前长度为 l 的直线位错的能量为:

$$W_0=\frac{\mu b^2 l}{4\pi k}\ln\frac{R}{r_0}$$

则位错弯曲后的能量增加为:

$$\Delta W=W_1+W_2-W_0=\frac{\mu b^2}{4\pi k}\Delta l\ln\frac{\lambda}{r_0}$$

故位错线增长 Δl 后所增加的能量为 ΔW,其比值为线张力 T:

$$T=\frac{\Delta W}{\Delta l}=\frac{\mu b^2}{4\pi k}\ln\frac{\lambda}{r_0} \tag{2-33}$$

取 $\lambda=100r_0$ 时,则得:

$$T\approx\frac{1}{2}\mu b^2 \tag{2-34}$$

由于远程应力场可互相抵消,所以弯曲位错的线张力小于直线位错的线张力。位错的线张力不仅驱使位错变直,而且也是晶体中位错呈三维网状分布的原因。因为位错网络中相交于同一结点的各位错,其线张力处于平衡状态,从而保证了位错在晶体中的相对稳定性。

2.5.3 弯曲位错的向心恢复力(f)(Centripetal Restoring Force)

当位错受切应力 τ 作用而发生弯曲时,其曲率半径为 r,在线张力 T 的作用下,产生一指向曲率中心的力 f,使位错线有变直的趋势,如图 2.14 所示。

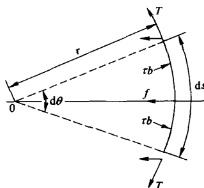


图 2.14 位错的线张力

若位错线长度为 ds,所对应的圆心角为 $d\theta$,且有 $d\theta=\frac{ds}{r}$。设 f 为单位长度位错线的向心恢复力,则作用在 ds 长位错线上的向心力为:

$$f\cdot ds=2T\sin\frac{d\theta}{2}$$

当 $d\theta$ 很小时,$\sin\frac{d\theta}{2}\approx\frac{d\theta}{2}$,故

$$f=\frac{Td\theta}{ds}=\frac{Td\theta}{rd\theta}=\frac{T}{r} \tag{2-35}$$

可见:$T\uparrow$ 或 $r\downarrow$ 均使 $f\uparrow$,要使位错线弯曲平衡,就要加一个外力,

大小与 f 相等,方向与 f 相反,即 $f=\tau b$(τb 为单位长度位错线所受的力)。所以有:

$$\tau b=\frac{T}{r}\approx\frac{\mu b^2}{2r}\text{或}\tau=\frac{\mu b}{2r}$$

即一条两端固定的位错线在切应力 τ 作用下将呈曲率半径为 r 的弯曲。此处 r 为在位错受作用力 τb 时,与位错线张力保持平衡时的位错曲率半径。

2.6　应力场对位错的作用力

前面讲了位错产生应力场,现在要讲应力场对位错的作用力,这个作用力可由外加应力产生,也可由晶体中其他位错或缺陷产生的应力场产生,为计算位错受力大小,先介绍一种简单方法,然后求出一般表达式。

2.6.1　求位错所受的力

位错受力可以用虚功原理求得。即用外力使晶体变形所做的功与位错受力运动所做的功相等来求得。

如图 2.15 所示,设有切应力 τ 使一小段位错线 dl 移动了 ds 距离,结果使晶体沿滑移面产生了 b 的滑移,故切应力所作的功为:

$$dW=(\tau dA)\cdot b=\tau dl ds\cdot b$$

此功也相当于作用在位错上的力 F 使位错线移动 ds 距离所作的功,即 $dW=Fdl\cdot ds$,

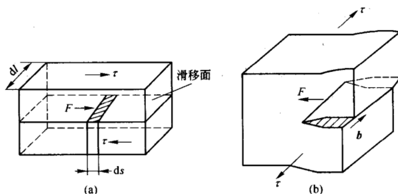


图 2.15　作用在位错上的力

(a) 一小段位错线移动;(b) 作用在螺型位错上的力

$$\tau \mathrm{d}l\mathrm{d}s \cdot b = F\mathrm{d}l \cdot \mathrm{d}s$$

$$F = \tau b \tag{2-36}$$

为位错所受的力,它是一种组态作用力,并不代表位错附近的原子实际上所受的作用力。位错是晶体中原子错排的组态,并不是物理实体,但处理问题时,看成实体。因为 b 是守恒的,所以 τ 不变,F 就不变,由此可知:1)外加切应力 τ 在位错线上所引起的作用力 F,其大小 $F = \tau b$,其方向垂直于位错线并指向未滑移区。2)作用于位错线上的力 F 与外加切应力 τ 的方向不一定是一致的(纯刃型位错与 τ 同向,纯螺型位错与 τ 垂直)。

以上是切应力作用在滑移面上使位错发生滑移的情况,这种位错线的受力也称滑移力。但如果对晶体施加一正应力分量,对刃型位错则可在垂直于滑移面的方向运动,即发生攀移,此时刃型位错所受的力也称为攀移力。

如图 2.16 所示,设有一单位长度的位错线,当晶体受到 x 方向的拉应力 σ 作用后,此位错线段在 F_y 作用下向下运动 $\mathrm{d}y$ 距离,则 $F_y \cdot \mathrm{d}y$ 为位错攀移所消耗的功。位错线向下攀移 $\mathrm{d}y$ 距离后,在 x 方向推开了一个 b 大小,引起晶体体积膨胀为 $\mathrm{d}y \cdot b \cdot 1$,而正应力所做膨胀功为 $-\sigma \cdot \mathrm{d}y \cdot b \cdot 1$。

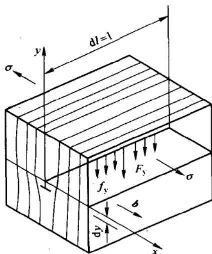


图 2.16 刃型位错的攀移力

根据虚功原理,$F_y \mathrm{d}y = -\sigma \cdot \mathrm{d}y \cdot b \cdot 1$,

$$F_y = -\sigma b。$$

由此可见,作用在单位长度刃型位错上的攀移力 F_y 的方向和位错线攀移方向一致,也垂直于位错线。σ 是作用在多余半原子面上的正应力,它的方向与 b 平行。至于负号表示 σ 为拉应力时,F_y 向下;若 σ 为压应力时,F_y 向上。

2.6.2 位错受力(Subjected Force of Dislocation)的一般表达式

位错在外加应力场作用下,将发生移动,这一效果相当于位错受力。晶体中的应力场(包括外加应力场,也包括其他晶体缺陷引起的内应力场)

通常是很复杂的，一个复杂的应力场对位错所产生的作用力将如何呢？

如图2.17所示，若晶体中有一段位错线元 $\mathrm{d}\boldsymbol{l}$，它的柏氏矢量为 $\boldsymbol{b}$，在外加应力场 σ 作用下，位移 ds 距离。这时可将柏氏矢量 $\boldsymbol{b}$ 分解为：

$$\boldsymbol{b} = b_x\boldsymbol{i} + b_y\boldsymbol{j} + b_z\boldsymbol{k}$$

式中，$\boldsymbol{i}$、$\boldsymbol{j}$、$\boldsymbol{k}$ 分别为 x、y、z 三个方向上的单位矢量。

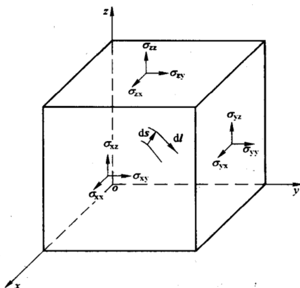


图2.17　晶体中的位错线元

把应力场 σ 写成：

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

应力 σ 在面积 $\mathrm{d}\boldsymbol{l} \times \mathrm{d}\boldsymbol{s}$ 上的作用力为：$\sigma \cdot (\mathrm{d}\boldsymbol{l} \times \mathrm{d}\boldsymbol{s})$

力 $\sigma \cdot (\mathrm{d}\boldsymbol{l} \times \mathrm{d}\boldsymbol{s})$ 位移 $\boldsymbol{b}$ 时所作的功为 W_1：

$$W_1 = \sigma \cdot (\mathrm{d}\boldsymbol{l} \times \mathrm{d}\boldsymbol{s}) \cdot \boldsymbol{b}$$

由混合积性质可得：

$$W_1 = \boldsymbol{b} \cdot \sigma \times \mathrm{d}\boldsymbol{l} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s}$$

作用在位错线 $\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ 上的力 $\boldsymbol{F}$ 所作的功为 W_2：

$$W_2 = \boldsymbol{F} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s}$$

因为

$$W_1 = W_2$$

所以 $\boldsymbol{F}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s}=\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}\times \mathrm{d}\boldsymbol{l}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s}$

$$\boldsymbol{F}=\boldsymbol{b}\boldsymbol{\sigma}\times \mathrm{d}\boldsymbol{l}$$

$$=(b_x b_y b_z)\begin{pmatrix}\sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz}\\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz}\\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{i}\\ \boldsymbol{j}\\ \boldsymbol{k}\end{pmatrix}\times \mathrm{d}\boldsymbol{l} \tag{2-37}$$

将其展开可得:

$$\boldsymbol{F}=[(\sigma_{xx}b_x+\sigma_{yx}b_y+\sigma_{zx}b_z)\boldsymbol{i}+(\sigma_{xy}b_x+\sigma_{yy}b_y+\sigma_{zy}b_z)\boldsymbol{j}+(\sigma_{xz}b_x+\sigma_{yz}b_y+\sigma_{zz}b_z)\boldsymbol{k}]\times \mathrm{d}\boldsymbol{l} \tag{2-38}$$

此式就是位错受力的一般表达式。

例 2-1 如图 2.18 所示,晶体中有一位错环 *ABCD*,柏氏矢量为 $\boldsymbol{b}$,求在切应力作用下各段位错线的受力。

解:首先设位错环的正方向如图上箭头所示,然后按式(2-37)可求出各段位错受力。

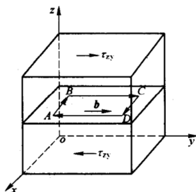


图 2.18 位错环受力

外加应力场为:$\boldsymbol{\sigma}=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \tau_{yz}\\ 0 & \tau_{zy} & 0\end{pmatrix}$,

柏氏矢量为:$\boldsymbol{b}=(0\quad b_y\quad 0)$。

$$\boldsymbol{F}_{AB}=(0\quad b_y\quad 0)\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \tau_{yz}\\ 0 & \tau_{zy} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{i}\\ \boldsymbol{j}\\ \boldsymbol{k}\end{pmatrix}\times(-\boldsymbol{i})$$

$$=b_y\tau_{yz}\boldsymbol{k}\times(-\boldsymbol{i})=-\tau_{yz}b_y\boldsymbol{j}$$

$$\boldsymbol{F}_{BC}=(0\quad b_y\quad 0)\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \tau_{yz}\\ 0 & \tau_{zy} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{i}\\ \boldsymbol{j}\\ \boldsymbol{k}\end{pmatrix}\times\boldsymbol{j}$$

$$=\tau_{yz}b_y\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{j}=-\tau_{yz}b_y\boldsymbol{i}$$

同理可得: $\boldsymbol{F}_{CD}=\tau_{yz}b_y\boldsymbol{j}$

$$\boldsymbol{F}_{DA}=\tau_{yz}b_y\boldsymbol{i}$$

可见,刃型、螺型位错均受力,在 τ 作用下,环在滑移面上滑移,结果,环扩大,滑出表面。

例 2-2　如图 2.19 所示，晶体中有一位错环 ABCD，柏氏矢量为 $\boldsymbol{b}$，求在正应力作用下各段位错线的受力。

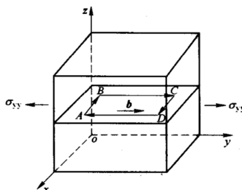


图 2.19　位错环受力

解：首先设位错环的正方向如图上箭头所示，然后按(2-37)式可求出各段位错受力。

外加应力场为：$\sigma=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & \sigma_{yy} & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$，柏氏矢量为：$\boldsymbol{b}=(0\quad b_y\quad 0)$。

$$\boldsymbol{F}_{AB}=(0\quad b_y\quad 0)\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & \sigma_{yy} & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{i}\\ \boldsymbol{j}\\ \boldsymbol{k}\end{pmatrix}\times(-\boldsymbol{i})$$

$$=\sigma_{yy}b_y\boldsymbol{j}\times(-\boldsymbol{i})=\sigma_{yy}b_y\boldsymbol{k}$$

$$\boldsymbol{F}_{BC}=(0\quad b_y\quad 0)\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & \sigma_{yy} & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{i}\\ \boldsymbol{j}\\ \boldsymbol{k}\end{pmatrix}\times(\boldsymbol{j})$$

$$=\sigma_{yy}b_y\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{j}=0$$

同理可得：

$$\boldsymbol{F}_{CD}=-\sigma_{yy}b_y\boldsymbol{k}$$

$$\boldsymbol{F}_{DA}=0$$

可见，在正应力作用下，刃型位错作攀移运动，螺型位错不受力，不动。

2.7　位错间的相互作用力(Interactive Force)

晶体中存在位错时，在它的周围便产生一个应力场。实际晶体中往

往有许多位错同时存在。当两个位错接近到一定距离,达到它们彼此的应力场作用范围时,两者就表现为相互作用,这就是位错间的相互作用力。即一个位错存在于晶体时,周围产生一个应力场,若在附近引入另一个位错,前一个位错的应力场必对后一个位错产生作用。

两个位错间的相互作用力的求法,实质上就是求出一个位错的弹性应力场对另一个位错所产生的作用力。

2.7.1 两个螺型位错间的相互作用力

A 两平行螺型位错间的相互作用力

如图 2.20(a)所示,设有两个平行螺型位错 S_1、S_2,其柏氏矢量分别为 $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$,位错线平行于 z 轴,且位错 S_1 位于原点 O 处,S_2 位于(r,θ)处。

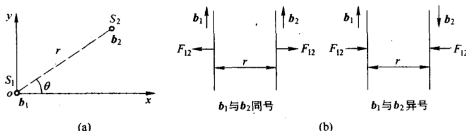


图 2.20 两平行螺型位错间的相互作用力

(a) 计算相互作用力的示意图;(b) 相互作用力的方向

由式(2-29)可知螺型位错的应力场为:

$$\sigma_{xz}=-\frac{\mu b}{2\pi}\frac{y}{x^2+y^2}$$

$$\sigma_{yz}=\frac{\mu b}{2\pi}\frac{x}{x^2+y^2}$$

$$\sigma_{xx}=\sigma_{yy}=\sigma_{zz}=\sigma_{xy}=\sigma_{yx}=0$$

位错 S_1 的应力场为:$\sigma_1=\begin{pmatrix}0 & 0 & \sigma_{xz}\\ 0 & 0 & \sigma_{yz}\\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & 0\end{pmatrix}$

S_2 位错的柏氏矢量为:$\boldsymbol{b}_2=(0\quad 0\quad b_2)$

S_2 位错的单位位错线长为:$\boldsymbol{k}$

因此,S_1、S_2 两位错间的相互作用力为:

$$\boldsymbol{F}_{12}=(0\quad 0\quad b_2)\begin{pmatrix}0 & 0 & \sigma_{xz}\\ 0 & 0 & \sigma_{yz}\\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{i}\\ \boldsymbol{j}\\ \boldsymbol{k}\end{pmatrix}\times\boldsymbol{k}$$

$$\boldsymbol{F}_{12}=b_2\sigma_{zx}\boldsymbol{i}\times\boldsymbol{k}+b_2\sigma_{zy}\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{k}=-b_2\sigma_{zx}\boldsymbol{j}+b_2\sigma_{zy}\boldsymbol{i}=\boldsymbol{F}_y+\boldsymbol{F}_x$$

$$\boldsymbol{F}_x=b_2\sigma_{zy}\boldsymbol{i}=b_2\frac{\mu b_1}{2\pi}\frac{x}{x^2+y^2}\boldsymbol{i}=\frac{\mu b_1 b_2}{2\pi}\frac{x}{x^2+y^2}\boldsymbol{i}$$

$$\boldsymbol{F}_y=-b_2\sigma_{zx}\boldsymbol{j}=b_2\frac{\mu b_1}{2\pi}\frac{y}{x^2+y^2}\boldsymbol{j}=\frac{\mu b_1 b_2}{2\pi}\frac{y}{x^2+y^2}\boldsymbol{j}$$

$$\boldsymbol{F}_{12}=\boldsymbol{F}_x+\boldsymbol{F}_y$$

$$\boldsymbol{F}_{12}=\sqrt{\boldsymbol{F}_x^2+\boldsymbol{F}_y^2}=\pm\frac{\mu b_1 b_2}{2\pi}\frac{1}{r}\quad(r\text{ 为两位错之间距离})$$

$$\boldsymbol{F}_{12}=\frac{\mu b_1 b_2}{2\pi}\frac{\boldsymbol{r}}{r^2}$$

可见，两平行螺型位错间的相互作用力，其大小与两位错的强度的乘积成正比，而与两位错间距离成反比，其方向则沿径向 r 垂直于所作用的位错线，当 $\boldsymbol{b}_1$ 与 $\boldsymbol{b}_2$ 同向时，$F_{12}>0$，即两同号平行螺型位错相互排斥；而当 $\boldsymbol{b}_1$ 与 $\boldsymbol{b}_2$ 反向时，$F_{12}<0$，即两异号平行螺型位错相互吸引，见图 2.20(b)。

B　两垂直螺型位错间的相互作用力

如图 2.21 所示，设有两个相互垂直的螺型位错 A、B，其柏氏矢量分别为 $\boldsymbol{b}_A$、$\boldsymbol{b}_B$，位错 A 的位错线平行于 z 轴，位错 B 的位错线平行于 x 轴，且位错 A 位于原点 o 处，B 位于(x,y)处。

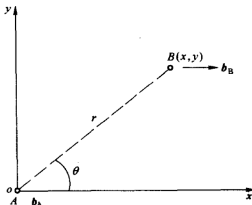


图 2.21　两垂直螺型位错间的相互作用力

位错 A 的应力场为：$\sigma_A=\begin{pmatrix}0 & 0 & \sigma_{xz}\\0 & 0 & \sigma_{yz}\\\sigma_{zx} & \sigma_{zy} & 0\end{pmatrix}$

位错 B 的柏氏矢量为：$\boldsymbol{b}_B=(b_B\quad 0\quad 0)$

位错 B 的单位位错线长为：$\boldsymbol{i}$

因此，A、B 两位错间的相互作用力为：

$$\boldsymbol{F}_{AB}=(b_B\quad 0\quad 0)\begin{pmatrix}0 & 0 & \sigma_{xz}\\0 & 0 & \sigma_{yz}\\\sigma_{zx} & \sigma_{zy} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{i}\\\boldsymbol{j}\\\boldsymbol{k}\end{pmatrix}\times\boldsymbol{i}$$

$$=b_B\sigma_{xz}\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{i}=b_B\sigma_{xz}\boldsymbol{j}$$

$$=-\frac{\mu b_A b_B}{2\pi}\frac{y}{x^2+y^2}\boldsymbol{j}$$

可见：当 $\boldsymbol{b}_B$ 与 $\boldsymbol{b}_A$ 同向时，$\boldsymbol{F}_{AB}<0$，即两同号相互垂直的螺型位错相互吸引；而当 $\boldsymbol{b}_B$ 与 $\boldsymbol{b}_A$ 反向时，$\boldsymbol{F}_{AB}>0$，即两异号相互垂直的螺型位错相互排斥。

2.7.2 两刃型位错间的相互作用力

A 两平行刃型位错间的相互作用力

如图 2.22 所示，设有两平行 z 轴，相距为 $r(x,y)$ 的刃型位错 e_1、e_2，其柏氏矢量分别为 $\boldsymbol{b}_1$ 和 $\boldsymbol{b}_2$，并均与 x 轴同向。令 e_1 位于坐标原点上，e_2 的滑移面与 e_1 的平行，且均平行于 $x-z$ 面。

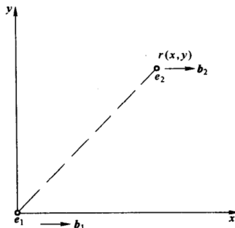


图 2.22 两平行刃型位错间的相互作用力

由式(2-27)可知刃型位错的应力场为：

$$\sigma_{xx}=-\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2}$$

$$\sigma_{yy}=-\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{y(y^2-x^2)}{(x^2+y^2)^2}$$

$$\sigma_{zz}=\nu(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})$$

$$\sigma_{xy}=-\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{x(y^2-x^2)}{(x^2+y^2)^2}$$

$$\sigma_{xz}=\sigma_{zx}=\sigma_{yz}=\sigma_{zy}=0$$

位错 e_1 的应力场为：$\sigma_1=\begin{pmatrix}\sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0\\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & 0\\ 0 & 0 & \sigma_{zz}\end{pmatrix}$

位错 e_2 的柏氏矢量为：$\boldsymbol{b}_2=(b_2\ 0\ 0)$

位错 e_2 的单位位错线长为：$\boldsymbol{k}$

因此，两位错间的相互作用力为：

$$\boldsymbol{F}_{12}=(b_2\quad 0\quad 0)\begin{pmatrix}\sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0\\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & 0\\ 0 & 0 & \sigma_{zz}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{i}\\ \boldsymbol{j}\\ \boldsymbol{k}\end{pmatrix}\times\boldsymbol{k}$$

$$=b_2\sigma_{xx}\boldsymbol{i}\times\boldsymbol{k}+b_2\sigma_{xy}\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{k}$$

$$=-b_2\sigma_{xx}\boldsymbol{j}+b_2\sigma_{xy}\boldsymbol{i}$$

$$=\boldsymbol{F}_y+\boldsymbol{F}_x$$

可见：$\boldsymbol{F}_x=b_2\sigma_{xy}\boldsymbol{i}$，使位错 e_2 沿 x 轴方向滑移，叫滑移力；$\boldsymbol{F}_y=-b_2\sigma_{xx}\boldsymbol{j}$，使位错 e_2 沿 y 轴方向攀移，叫攀移力。

$$\boldsymbol{F}_x=b_2\sigma_{xy}\boldsymbol{i}=\frac{\mu b_1 b_2}{2\pi(1-\nu)}\frac{x(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2}\boldsymbol{i}$$

$$\boldsymbol{F}_y=-b_2\sigma_{xx}\boldsymbol{j}=\frac{b_2 b_1\mu}{2\pi(1-\nu)}\frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2}\boldsymbol{j}$$

从图 2.23 可看出：

1）对于两个同号平行的刃型位错，滑移力 $\boldsymbol{F}_x$ 随位错 e_2 所处的位置而变化，它们之间的相互作用如图 2.23(a)所示，归纳如下：

当 $|x|>|y|$ 时，若 $x>0$，则 $\boldsymbol{F}_x>0$；若 $x<0$，则 $\boldsymbol{F}_x<0$，这说明当位错 e_2 位于图 2.23(a)中的①、②区间时，两位错相互排斥。

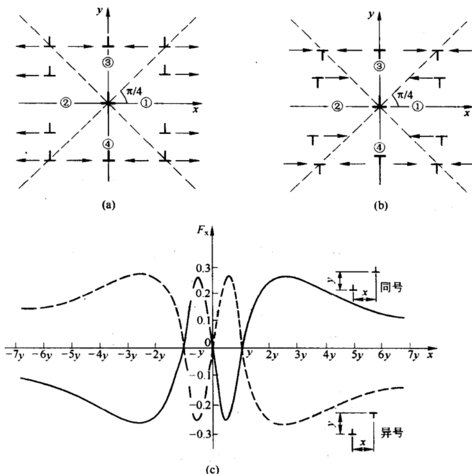


图 2.23 两刃型位错在 x 轴方向上的相互作用

(a) 同号位错;(b) 异号位错;(c) 两平行刃型位错沿柏氏矢量方向的相互作用力

当$|x|<|y|$时,若 $x>0$,则 $\boldsymbol{F}_x<0$;若 $x<0$,则 $\boldsymbol{F}_x>0$,这说明当位错 e_2 位于图 2.23(a)中的③、④区间时,两位错相互吸引。

当$|x|=|y|$时,$\boldsymbol{F}_x=0$,位错 e_2 处于介稳定平衡位置,一旦偏离此位置就会受到位错 e_1 的吸引或排斥,使它偏离的更远。

当 $x=0$ 时,即位错 e_2 处于 y 轴上时,$\boldsymbol{F}_x=0$,位错 e_2 处于稳定平衡位置,一旦偏离此位置就会受到位错 e_1 的吸引而退回原处,使位错垂直地排列起来。通常把这种呈垂直排列的位错组态称为位错墙,它可构成小角度晶界。

当 $y=0$ 时,若 $x>0$,则 $\boldsymbol{F}_x>0$;若 $x<0$,则 $\boldsymbol{F}_x<0$。此时 $\boldsymbol{F}_x$ 的绝对

值和 x 成反比,即处于同一滑移面上的同号刃型位错总是相互排斥的,位错间距离越小,排斥力越大。

至于攀移力 F_y,由于它与 y 同号,当位错 e_2 在位错 e_1 的滑移面上边时,受到的攀移力 F_y 是正值,即指向上;当位错 e_2 在位错 e_1 的滑移面下边时,受到的攀移力 F_y 是负值,即指向下。因此,两位错沿 y 轴方向是互相排斥的。

2) 对于两个异号平行的刃型位错,它们之间的相互作用力 F_x、F_y 的方向与上述同号位错时相反,而且位错 e_2 的稳定位置和介稳定平衡位置正好相互对换,$|x|=|y|$时,位错 e_2 处于稳定平衡位置,如图 2.23(b)所示。

图 2.23(c)综合地展示了两平行刃型位错间的相互作用力 F_x 与距离 x 之间的关系。图中 y 为两位错的垂直距离(即滑移面间距),x 表示两位错的水平距离(以 y 的倍数度量),F_x 的单位为$\frac{b_2b_1\mu}{2\pi(1-\nu)y}$。可以看出,两同号位错间的作用力(图中实线)与两异号位错间的作用力(图中虚线)大小相等,方向相反。

至于异号位错的 F_y,由于它与 y 异号,所以沿 y 轴方向的两异号位错总是相互吸引,并尽可能靠近乃至最后消失。

B　两相互垂直刃型位错的相互作用力

两个相互垂直的刃型位错,其垂直情况可有几种,但不管取哪一种,其相互作用力都表现为攀移力。

2.7.3　刃型位错与螺型位错间的相互作用力

如果刃型位错线与螺型位错线平行时,两者之间的作用力为零,即相互不发生作用。如果刃型位错线与螺型位错线垂直时,因其垂直情况不同,其相互作用情况也不同,比较复杂,这里不予讨论。

2.8　位错与溶质原子(Solute Atoms)的交互作用能

溶质原子是晶体中的一种点缺陷。由于溶质原子与溶剂原子的体积不同,晶体中的溶质原子会使其周围晶体发生弹性畸变,而产生应力场。位错与溶质原子的弹性交互作用,是通过它们的应力场而发生作用的。其作用结果是晶体内的弹性能降低。位错与溶质原子的交互作用能等于

溶质原子进入晶体时,克服位错应力场所作的功。

假设溶质原子引起的弹性畸变是球形对称的。将点缺陷处于刃型位错应力场中的(R,α)处,如图2.24所示。

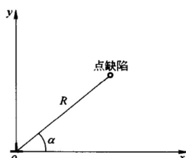


图2.24 点缺陷在刃型位错应力场中的位置

溶剂(Solvent)原子半径(或间隙位置半径)为r,溶质(Solute)原子半径为r',且$r'>r$。那么溶质原子进入溶剂中后,引起的体积变化ΔV为:

$$\Delta V=\frac{4}{3}\pi r'^3-\frac{4}{3}\pi r^3$$

在径向上的变形为:$\varepsilon=\frac{r'-r}{r}$称为错配度(Misfit Factor)。当$\varepsilon$很小时,则$\Delta V$为:$\Delta V\approx 4\pi\varepsilon r^3$

膨胀的距离为:$r'-r=\varepsilon r$,而$r'=r(1+\varepsilon)$

先求出受力,然后乘以膨胀距离就是功。如图2.25所示,o点为点缺陷中心位置,P为其表面上任意一点,r为其半径。作用于P点的小面积元近似地看成在P点的小矩形。上面的边长为$r\sin\theta d\varphi$,左边的边长为$r d\theta$,因此在P点处的小矩形面积为:

$$r\sin\theta d\varphi r d\theta$$

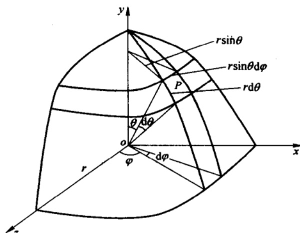


图2.25 点缺陷示意图

把点缺陷放入刃型位错的应力场中。点缺陷受位错应力场作用,各处受

力相等。位错应力场作用在球体法线方向的应力为 σ_{rr}(单位表面积受力)。

总的受力为:$\sigma_{rr} r\sin\theta d\varphi r d\theta$,所以功为:

$$功 = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} r\varepsilon\sigma_{rr} r\sin\theta d\varphi r d\theta$$

故位错与溶质原子间的交互作用能 Δu 为:

$$\Delta u = -\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} r\varepsilon\sigma_{rr} r\sin\theta d\varphi r d\theta$$

因为

$$\begin{aligned}\sigma_{rr} = {} & \sin^2\theta\sin^2\varphi\sigma_{xx} + \cos^2\theta\sigma_{yy} + \sin^2\theta\cos^2\varphi\sigma_{zz} + 2\sin\theta\sin\varphi\cos\theta\sigma_{xy} \\ & + 2\cos\theta\sin\theta\cos\varphi\sigma_{yz} + 2\sin^2\theta\sin\varphi\cos\varphi\sigma_{zx}\end{aligned} \tag{2-39}$$

所以

$$\begin{aligned}\Delta u = {} & -\varepsilon r^3\Big[\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\sin^3\theta d\theta\sin^2\varphi d\varphi\sigma_{xx} + \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\sin\theta\cos^2\theta d\theta d\varphi\sigma_{yy} \\ & + \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\sin^3\theta d\theta\cos^2\varphi d\varphi\sigma_{zz} + \underset{\substack{\Downarrow \\ 0}}{其他项}\Big]\end{aligned}$$

$$\Delta u = -\frac{4}{3}\pi\varepsilon r^3(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})$$

将 $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$代入,整理得:

$$\Delta u = \frac{4}{3}\varepsilon r^3\frac{1+\nu}{1-\nu}\mu b\frac{y}{x^2+y^2} = \frac{4}{3}\frac{1+\nu}{1-\nu}\mu b\varepsilon r^3\frac{\sin\alpha}{R}$$

放入溶质原子体积膨胀为:$\Delta V \approx 4\pi\varepsilon r^3$

所以
$$\Delta u = \frac{1}{3\pi}\frac{1+\nu}{1-\nu}\mu b(\Delta V)\frac{\sin\alpha}{R} \tag{2-40}$$

或
$$\Delta u = A\varepsilon\frac{\sin\alpha}{R}$$

式中,$A = \frac{4}{3}\frac{1+\nu}{1-\nu}\mu b r^3$,式(2-40)就是位错与溶质原子的交互作用能。其物理意义为:

$$\begin{aligned}\Delta u & = -\frac{4}{3}\pi\varepsilon r^3(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}) \\ & = -\frac{\Delta V}{3}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}) \\ & = -\sigma_{rr}\Delta V\end{aligned}$$

式中，$\sigma_{rr}=\frac{1}{3}(\sigma_{xx}+\sigma_{yy}+\sigma_{zz})$，即溶质原子置换(Substitute)溶剂原子引起的体积膨胀为 $4\pi\varepsilon r^3$ 要对 σ_{rr}作功，这个功的负值就是交互作用能。

由式(2-40)可知，Δu 与溶质原子在刃型位错应力场中的位置有关。$\Delta u<0$ 表示位错吸引溶质原子；$\Delta u>0$ 表示位错排斥溶质原子。$\varepsilon>0$ 表示溶质原子半径大于溶剂原子半径。当 $\varepsilon>0$ 并且溶质原子处在刃型位错压应力区域，则 $\Delta u>0$，若溶质原子处在刃型位错拉伸应力区域，则 $\Delta u<0$。当 $\varepsilon<0$ 时，位错对溶质原子的作用情况相反。因此，溶质原子半径大于溶剂原子半径时，溶质原子会集聚于刃型位错下方的拉伸应力区域。而当溶质原子半径小于溶剂原子半径时，溶质原子会集聚于刃型位错的压应力区。间隙原子总是大于基体原子的间隙，所以总是引起膨胀，吸附在刃型位错的拉应力区，如图 2.26 所示。位错与溶质原子的交互作用会引起溶质原子向位错线集聚，位错线附近云集溶质原子，形成了溶质原子气团或溶质原子云，称为柯氏气团。溶质原子气团使位错处于更加稳定状态，即它有钉扎位错的作用。用柯氏气团可以解释低碳钢拉伸时出现上下屈服点现象。

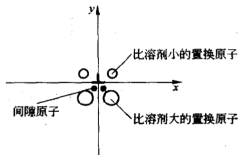


图 2.26 溶质原子和刃型位错交互作用示意图

2.9 位错的半点阵(Semilattice)模型

前面讲的是位错连续介质模型，不能反映位错中心的情况，派尔斯和纳巴罗提出较简单的点阵模型来处理位错中心问题。1940 年，派尔斯假设了在简单四方晶体中形成一个刃型位错的数学模型，1947 年经纳巴洛加以发展，计算出位错的中心宽度，并进一步计算出使位错在晶体中开始运动所需的切应力。所用的这个模型称为 P-N 模型。在这个模型中将

滑移面视为晶体点阵结构，而在滑移面之外仍视为连续弹性介质，因此有位错的半点阵模型之称。

2.9.1　P-N模型及其基本公式

如图2.27所示，假设将具有简单立方结构的完整晶体沿滑移面割开，并相对位移$\frac{b}{2}$，然后拼起来形成刃型位错。

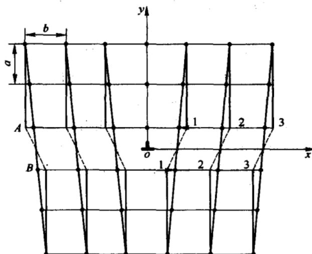


图2.27　两块简单立方晶体形成的刃型位错

图2.27中位于滑移面A和B上的原子都作了适当的移动，达到平衡位置。令$\varphi(x)$表示A层与B层对应原子之间在x方向的相对位移，如1-1,2-2,3-3之间的距离。

两块晶体未拼时：

$$x>0, \varphi^0(x)=+\frac{b}{2}$$

$$x<0, \varphi^0(x)=-\frac{b}{2}$$

两块晶体拼起来后，A层原子受两个力作用，

1) A层原子受B层原子的吸引作用，使A层和B层对应原子尽量靠近对齐(除了A层处于原点o的原子以外)；

2) A层原子受A层以上原子的作用，不让其向B层原子靠近，以维持与上部晶体中原子对齐。

A 层原子就在上述两个力作用下维持平衡。在作用 1)中(在滑移面内)引入点阵的周期性;在作用 2)中采用连续弹性介质模型处理。1)与 2)大小相等,方向相反。

(1) 在 1)作用下,A、B 层原子都发生位移,其位移量相等,方向相反。设 A 层上原子沿 x 轴位移为 $u(x)$,而 B 层上原子作等量反向位移为 $-u(x)$,则有:

$$x>0,u(x)<0$$
$$x<0,u(x)>0$$
$$x=0,u(x)=0$$

两块晶体连接后,对应原子间距离缩短了,因此有:

$$x>0,\varphi(x)=+\frac{b}{2}+2u(x)$$

$$x<0,\varphi(x)=-\frac{b}{2}+2u(x)$$

由于在 $x=\pm\infty$ 处位错的影响消失,滑移面上下同号原子应对齐,使 $\varphi(x)=0$,即得:

$$\begin{aligned} u(\infty)&=-\frac{b}{4} \\ u(-\infty)&=\frac{b}{4} \end{aligned} \tag{2-41}$$

并有 $x=0,u(0)=0$。这就是 $u(x)$ 所必须满足的边界条件,如图 2.28 所示。

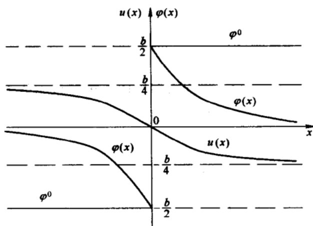


图 2.28 刃型位错的位移函数

设：A、B 两层原子之间相互作用的切应力 σ_{yx} 是位移 $\varphi(x)$ 的正弦函数，周期为 b，可得出：

$$\sigma_{\overleftarrow{yx}} = C\sin\left(\frac{2\pi\varphi}{b}\right) \approx C\,\frac{2\pi\varphi}{b} \quad \text{（表示沿 } x \text{ 负方向的切应力）}$$

式中，C 为常数。当 φ 很小时，满足胡克定律可表达为：

$$\sigma_{yx} = 2\mu\varepsilon_{yx} = \mu\,\frac{\varphi}{a}$$

式中，a 为面间距。由此可定出常数 C，即

$$\mu\,\frac{\varphi}{a} = C\,\frac{2\pi\varphi}{b}$$

$$C = \frac{\mu}{2\pi}\frac{b}{a}$$

所以

$$\sigma_{\overleftarrow{yx}} = \frac{\mu}{2\pi}\frac{b}{a}\sin\left(\frac{2\pi\varphi}{b}\right)$$

在 $x>0$ 一侧，$\varphi(x) = \frac{b}{2} + 2u(x)$ 代入上式，得

$$\sigma_{\overleftarrow{yx}} = -\frac{\mu}{2\pi}\frac{b}{a}\sin\left(\frac{4\pi u(x)}{b}\right) \tag{2-42}$$

即为 B 层原子对 A 层原子沿 x 负方向的切应力。

(2) 在 2)作用下，其作用力为 $\sigma_{\overleftarrow{yx}}$，并将 A 层以上、B 层以下晶体视为各向同性的连续弹性介质，可用式(2-27)，但要解决位错中心 r_0 处位错的分布问题。1949 年俄歇尔拜(J.D.Eshelby)提出一个解决这个问题的简单方法。

将 $\boldsymbol{b}$ 柏氏矢量分成无穷多的小位移连续分布在滑移面上，从 $x=-\infty$ 到 $x=\infty$，其柏氏矢量之和等于 $\boldsymbol{b}$。

设分布在 $x'\rightarrow x'+dx'$ 范围内的柏氏矢量分布函数为 $f(x')\mathrm{d}x'$，总的柏氏矢量

$$b = \int_{-\infty}^{\infty} f(x')\mathrm{d}x'$$

由式(2-27)，在滑移面上，$y=0$，得

$$\sigma_{yx} = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{x(y^2-x^2)}{(x^2+y^2)^2} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{1}{x}$$

分布在 $x'\rightarrow x'+\mathrm{d}x'$ 之间的位错产生在滑移面上 x 处的切应力为：

$$d\sigma_{\underrightarrow{yx}} = \frac{\mu f(x')dx'}{2\pi(1-\nu)}\frac{1}{x-x'}$$

在 $x>0$ 一侧,全部小位错产生在 x 处的切应力为:

$$\sigma_{\underrightarrow{yx}} = \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(x')}{x-x'}dx' \tag{2-43}$$

$f(x')dx'$就是x'和$x'+dx'$两点上下相对位移之差。因为在 $x>0$ 一侧,x'的相对位移为 $-2u(x')$,而 $x'+dx'$的相对位移为 $-2u(x'+dx')$,所以在 $x>0$ 一侧,位移为负值,即

$$f(x')dx' = -d\varphi(x') = -2du(x')$$

将 $f(x')dx' = -\frac{d\varphi(x')}{dx'}dx' = -2\frac{du(x')}{dx'}dx'$代入式(2-43)

$$\sigma_{\underrightarrow{yx}} = -\frac{\mu}{\pi(1-\nu)}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\frac{du(x')}{dx'}dx'}{x-x'} \tag{2-44}$$

即为 A 层以上部分对 A 层沿 x 正方向的切应力。

因为 A 层原子在$\sigma_{\underrightarrow{yx}}$和 $\sigma_{\underrightarrow{yx}}$两个力作用下保持平衡,所以两者应相等,即平衡时:式(2-44)与式(2-42)相等,整理后得:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\frac{du(x')}{dx'}dx'}{x-x'} = \frac{1-\nu}{2}\frac{b}{a}\sin\frac{4\pi u(x)}{b} \tag{2-45}$$

此式为 P-N 模型的基本公式,即 P-N 方程。

2.9.2 位错中心宽度(Dislocation Central Width)

式(2-45)在满足式(2-41)的边界条件的情况下,方程的解为:

$$u(x) = -\frac{b}{2\pi}\tan^{-1}\frac{2(1-\nu)x}{a} = -\frac{b}{2\pi}\tan^{-1}\frac{x}{f} \tag{2-46}$$

其中,$f=\frac{a}{2(1-\nu)}$,称为位错的半宽度。当 $x=\pm f$ 时,$u(x)=\mp\frac{b}{8}$为无穷远处 $u(x)$的一半,见图 2.29 所示。故人们认为从 $-f$ 到 $+f$ 是原子严重错排区域的范围,称 $2f$ 为位错宽度。对一般金属:$\nu=\frac{1}{3}$,所以,位错宽度 $2f=\frac{3}{2}a$。

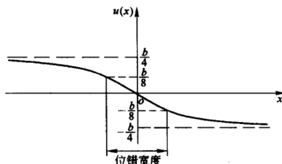


图 2.29　位错宽度示意图

2.9.3　位错移动所需的临界切应力(Critical Shear Stress)(即 P-N 力)

当刃型位错正好处在对称位置时，能使它运动的外力几乎为零。但是当位错稍许离开平衡位置时，由于对称位置被破坏，这种位移立即就会遇到点阵阻力，现在要计算位错产生运动时所遇到的最大阻力，这个最大阻力称为位错移动的临界切应力，也称为 P-N 力。计算的关键是求出位错偏离出平衡位置时滑移面上下两层原子没对齐而引起的能量变化，即错排能。

如图 2.30 所示，假设 A、B 两层对应原子对齐时，原子的作用能为 0；没对齐时，相对位移为 φ，它们之间的错排能为：

$$\Delta u_{AB} = \int_0^{\varphi} \sigma_{yx} \cdot 1 \cdot b \mathrm{d}\varphi$$

式中　Δu_{AB}——每对对应原子列的错排能；

$1 \cdot b$——滑移面上每单位长度原子列的面积。

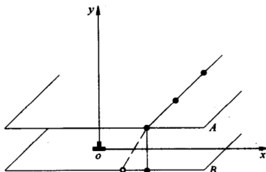


图 2.30　刃型位错位置示意图

将 $\sigma_{yx}=\dfrac{\mu b}{2\pi a}\sin\dfrac{2\pi\varphi}{b}$ 代入上式，并且分摊到每一原子列的错排能为 $\dfrac{1}{2}\Delta u_{AB}$

$$\frac{1}{2}\Delta u_{AB}=\frac{b}{2}\int_0^{\varphi}\frac{\mu b}{2\pi a}\sin\frac{2\pi\varphi}{b}\mathrm{d}\varphi$$

将 $\varphi(x)=2u(x)+\dfrac{b}{2}$，$u(x)=-\dfrac{b}{2\pi}\arctan\dfrac{x}{f}$ 代入，整理得

$$\frac{1}{2}\Delta u_{AB}=\frac{\mu b^3}{4\pi^2 a}\frac{f^2}{x^2+f^2} \tag{2-47}$$

若位错正好在中心平衡位置，A、B 两层上原子的位置可用一个式子表示，如图 2.31 所示：

$$x=\frac{1}{2}nb \quad n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

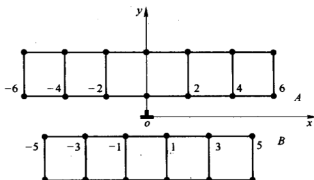


图 2.31 各原子位置示意图

若位错中心移动 $\alpha b(\alpha<1)$，则原子的位置可表达为：

$$x=\frac{1}{2}nb+\alpha b=\left(\frac{n}{2}+\alpha\right)b \tag{2-48}$$

将式(2-48)代入式(2-47)得到单位长度位错所牵涉到的全部错排能为：

$$u_{AB}=\frac{\mu b^3}{4\pi^2 a}\sum_{-\infty}^{\infty}\frac{f^2}{\left[\left(\frac{n}{2}+\alpha\right)b\right]^2+f^2}$$

$$=\frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)}\left(1+2\mathrm{e}^{-\frac{4\pi f}{b}}\cos 4\pi\alpha\right)$$

式中,第一项$\frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)}$与 α 无关,是错排能的主要部分,代表静止位错中心部分的错排能;第二项$\frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)}2e^{-\frac{4\pi f}{b}}\cos 4\pi\alpha$ 是与位置 α 有关的项,但绝对值很小,是位置的周期函数,反映了位错运动时引起的势能起伏。位错移动时,要攀越势能(Potential Energy)垒,必然会遇到阻力,其所受阻力大小为:

$$F=-\frac{\partial u_{AB}}{\partial(\alpha b)}=\frac{2\mu b}{1-\nu}e^{-\frac{4\pi f}{b}}\sin(4\pi\alpha) \tag{2-49}$$

可见:位错移动时所受阻力 F 是周期性的,α 由 $0\to\frac{1}{2}$ 是一个周期。当 $\sin(4\pi\alpha)=1$ 时,阻力最大,此时:

$$F=F_{\max}=\frac{2\mu b}{1-\nu}e^{-\frac{4\pi f}{b}}$$

只有当外加切应力克服 $F_{\max}$时,位错才可运动,使位错越过点阵错排能势垒而运动的外加切应力称为临界切应力,用 σ_c 表示。

因为 $F_{\max}=\sigma_c b$ 中,b 是位错本身的柏氏矢量,是守恒的;σ_c 是外加切应力。当 σ_c 不变时,F 不变。所以位错线受力垂直于位错线且到处相等。故

$$\sigma_c=\frac{F_{\max}}{b}=\frac{2\mu}{1-\nu}e^{-\frac{4\pi f}{b}}=\frac{2\mu}{1-\nu}e^{-\frac{2\pi a}{b(1-\nu)}} \tag{2-50}$$

式中,σ_c 称为 P-N 力,它相当于在理想晶体中克服点阵阻力移动一个位错所需的临界切应力。

式(2-50)说明了两个问题:

1) 根据 P-N 模型计算出的 σ_c 与实际测出的基本相符,这是派尔斯和纳巴洛的最大贡献,也是第一次定量地从理论上解释了位错的易动性,即:晶体中有位错时,使其强度大大下降的现象。

2) $\frac{a}{b}$ 出现在指数函数中,随$\frac{a}{b}$增加,σ_c 降低,表明滑移应产生于原子密排面之间,沿原子密排方向进行,符合实验事实。

派尔斯和纳巴洛工作的重要性还在于他们突破了连续介质模型,初步用点阵结构来处理位错中心问题,当然半点阵模型也有其不足之处。

2.10　位错的塞积群(Dislocation Pile-up Group)

滑移面上有一位错源(Dislocation Source),放出一系列位错,在 τ_0 作

用下运动，遇到障碍时，塞积在障碍前形成位错系列，称为塞积群，如图2.32所示。

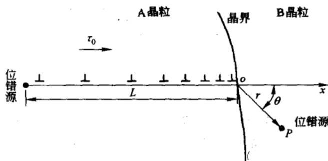


图2.32 位错塞积群示意图

在塞积群中，每个位错都受两个力的作用而处于平衡状态，一个力是外加切应力 τ_0 的作用；另一个力是其他位错应力场的作用。因同号位错在同一滑移面上互相排斥，所以塞积群中位错排列具有一定的规律性，离障碍物越远越稀疏。

2.10.1 塞积群中位错的分布(Distribution)

设互相平行的直刃位错分布在 $y=0$ 的平面上，使位错线平行于 z 轴，有 n 个位错沿 x 轴塞积。考虑第 j 个位错，它受两个力作用，一个是外加切应力对它的作用 $\tau_0 b$，该力使 j 位错向 x 正方向移动；另一个是除 j 位错外所有其他位错的应力场对第 j 个位错的作用力。根据作用力公式，第 i 个位错的应力场对 j 位错沿 x 负方向的作用力为：

$$F_{\mathrm{ij}}=\frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)}\frac{1}{x_{\mathrm{j}}-x_{\mathrm{i}}}$$

除 j 位错外，所有位错对 j 位错的作用力之和为：

$$F_{总}=\frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)}\sum_{\substack{i=1\\i\neq j}}^{n}\frac{1}{x_j-x_i}$$

平衡时，j 位错所受的作用力之和为零。

$$F_{\mathrm{j}}=\tau_0 b-\frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)}\sum_{\substack{i=1\\i\neq j}}^{n}\frac{1}{x_j-x_i}=0$$

令 $D=\dfrac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}$，则

$$\frac{\tau_0}{D} = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n} \frac{1}{x_j - x_i} \tag{2-51}$$

此方程为塞积群的平衡方程,解出此方程可求出塞积群中各位错的位置。此式求解困难,但可求出其近似解。
当 n 很大时,

$$x_{\mathrm{i}} = \frac{D\pi^2}{8n\tau_0}(i-1)^2 \tag{2-52}$$

式(2-52)表明:各位错的位置 x_{i} 与 $(i-1)^2$ 成正比,即位错在塞积群中排列是不均匀的,愈靠近障碍,排列愈密,与观测值符合很好。

第 n 个位错的位置 x_{n} 可近似地看成塞积群的总长度,用 L 表示。

$$L \approx x_{\mathrm{n}} = D\frac{\pi^2 n}{8\tau_0} \approx 2D\frac{n}{\tau_0} \tag{2-53}$$

式中,$D = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}$时,塞积的为刃型位错;$D = \frac{\mu b}{2\pi}$时,塞积的为螺型位错。

在长度为 L 的塞积群中的位错数目为:

$$n = \frac{\tau_0 L}{2D} \tag{2-54}$$

式(2-54)说明,位错塞积群中的位错个数 n 正比于外加切应力 τ_0 和位错源至障碍物间距离 L。当 L 一定时,晶体滑移面受 τ_0 作用,位错源不断放出位错,使塞积群中的位错数目逐渐增多。当位错达到一定数目 n 时,塞积群便可以抑制位错源继续向外放出位错。这时要想使位错源继续不断地增殖,必须不断地增加外加切应力 τ_0。

2.10.2 塞积群对障碍物(Barrier)的作用力

塞积群不仅对位错源有抑制作用,而且对障碍物也有作用。若塞积群对障碍物的作用力为 τ,则障碍物对塞积群的反作用力的大小与 τ 相等,而方向与 τ 相反。障碍物对塞积群的反作用力可以看作只作用于领先位错上。

若塞积群中有 n 个位错,在外加切应力 τ_0 作用下,使整个塞积群向前移动 δx 距离时所作的功为 $n\tau_0 b\delta x$,它应该等于障碍物阻止塞积群向前移动 δx 距离所作的功 $\tau b\delta x$。

即有:

$$\tau b\delta x = n\tau_0 b\delta x$$

所以：

$$\tau = n\tau_0 \tag{2-55}$$

由式(2-55)可知，由 n 个位错组成的塞积群，在外加切应力 τ_0 的作用下，其对障碍物的作用力 τ 比 τ_0 大 n 倍，且塞积群中的位错数目越多，塞积群对障碍物的作用力越大。说明领先位错的前端会产生很大的应力集中。这种强大的应力集中可以使塞积群中的螺型位错通过交滑移而越过障碍物。也会使领先位错前端的相邻晶粒内的位错源开动。这种应力集中大到一定程度时，甚至可以把障碍物摧毁。

3 位错的运动与交割

金属受外力作用后产生宏观的塑性变形，而这种宏观上的塑性变形实质是位错在外力作用下运动的结果，位错的运动特点能够说明晶体形变过程中临界切应力为何很小，以及位错的增殖、形变强化等许多现象。因此，位错如何运动是位错理论的基本问题之一。

3.1 位错的运动(Dislocation Movement)

3.1.1 刃型位错的滑移(Slip)运动

如果在刃型位错的滑移面上施加一个垂直于位错线的切应力，这个位错线就很容易在滑移面上运动起来，当然这种运动只牵涉到靠近位错心部不多的一些原子，而离位错心部较远的原子不受位错移动的影响，因此使位错移动的切应力是很小的。

图 3.1 为刃型位错的移动过程。在外加切应力 τ 的作用下位错中心附近的原子由"•"位置移动小于一个原子间距的距离到达"◦"的位置，使位错在滑移面上向左移动了一个原子间距。如果切应力继续作用，位错将继续向左逐步移动。当位错线沿滑移面滑移通过整个晶体时，就会在晶体表面沿柏氏矢量方向产生宽度为一个柏氏矢量大小的台阶，即造成了晶体的塑性变形，如图 3.1(b)所示。从图中可知，随着位错的移动，位错线所扫过的区域 *ABCD* 逐渐扩大，未滑移区逐渐缩小，两个区域始终以位错线为分界线。在滑移时，刃型位错的运动方向始终垂直于位错线而平行于柏氏矢量。刃型位错的滑移面是由位错线与柏氏矢量所构成的平面，且是唯一的。

在相同外加切应力的作用下，正、负刃型位错的运动方向相反，但产生的变形却完全相同。

两排符号相反的刃型位错，在距离小于 1 nm 的两个滑移面上运动，相遇后对消而产生裂纹(Crack)萌芽，如图 3.2 所示。

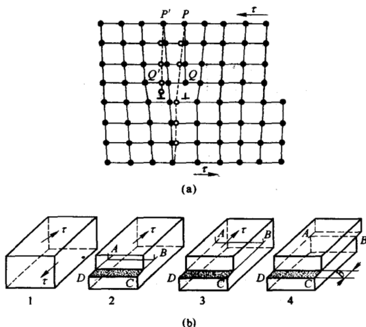


图 3.1 刃型位错滑移的示意图

(a) 滑移时周围原子的位移;(b) 滑移过程

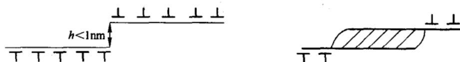


图 3.2 裂纹萌芽的产生

3.1.2 螺型位错及混合型位错的滑移运动

因螺型位错有无数多个滑移面,所以它的位错线在晶体中可以平行于它的柏氏矢量作任意移动。图 3.3 为螺型位错的移动过程。图 3.3(a)表示螺型位错运动时,位错线周围原子的移动情况,图中“○”表示滑移面以下的原子,“•”表示滑移面以上的原子。由图可知,同刃型位错一样,滑移时位错线附近原子的移动量很小,所以使螺型位错运动所需的力也很小。当位错线沿滑移面滑过整个晶体时,同样会在晶体表面沿柏氏矢量方向产生宽度为一个柏氏矢量的台阶,见图 3.3(b)所示。在滑移时,螺型位错的移动方向与位错线垂直,也与柏氏矢量垂直,其滑移过程见图 3.3(c)所示。

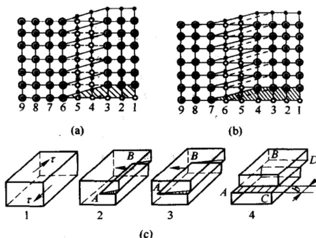


图 3.3　螺型位错滑移的示意图

(a) 原始位置;(b) 位错向左移动了一个原子间距;(c) 滑移过程

混合型位错的移动情况如图 3.4 所示。根据确定位错线运动方向的右手法则,即以拇指代表沿着柏氏矢量 $\boldsymbol{b}$ 移动的那部分晶体,食指代表位错线方向,则中指就表示位错线移动方向,该混合位错在外加切应力 τ 作用下,将沿其各点的法线方向在滑移面上向外扩展,最终使上下两块晶体沿柏氏矢量方向移动一个 b 大小的距离。

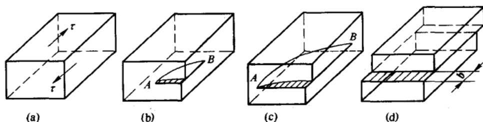


图 3.4　混合型位错的滑移过程

通过上述分析可知,不同类型位错的滑移方向与外加切应力和柏氏矢量的方向不同,如图 3.5 所示。刃型位错的滑移方向与外加切应力 τ 及柏氏矢量 $\boldsymbol{b}$ 一致,正、负刃型位错方向相反;螺型位错的滑移方向与外加切应力 τ 及柏氏矢量 $\boldsymbol{b}$ 垂直,左、右螺型位错方向相反;混合型位错的滑移方向与外加切应力 τ 及柏氏矢量 $\boldsymbol{b}$ 成一定角度,晶体的滑移方向与外加切应力 τ 及柏氏矢量 $\boldsymbol{b}$ 相一致。

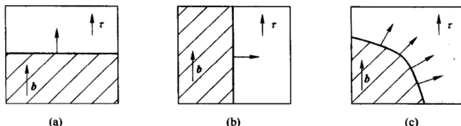


图 3.5 位错的滑移方向与外加切应力 τ 及柏氏矢量 **b** 的关系
(a) 刃型位错;(b) 螺型位错;(c) 混合型位错

3.1.3 刃型位错的攀移(Climb)运动

刃型位错在垂直于滑移面方向的运动称为攀移。通常把多余半原子面向上运动称为正攀移,向下运动称为负攀移,如图 3.6 所示。刃型位错的攀移相当于多余半原子面的伸长或缩短,可通过物质迁移即原子或空位的扩散来实现。如果有空位迁移到半原子面下端或半原子面下端的原子扩散到别处,半原子面将缩小,即位错向上运动,则发生正攀移;反之,若有原子扩散到半原子面下端,半原子面将扩大,位错向下运动,发生负攀移。螺型位错没有多余的半原子面,因此不会发生攀移运动。

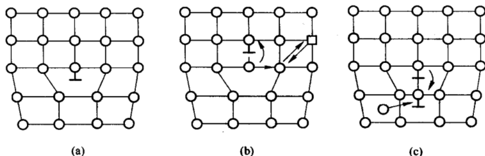


图 3.6 刃型位错的攀移运动示意图
(a) 未攀移的位错;(b) 空位引起的正攀移;(c) 间隙原子引起的负攀移

由于攀移伴随着位错线附近原子的增加或减少,即有物质的迁移,也就有体积的变化,故把攀移运动称为"非守恒运动";而没有体积变化的滑移运动称为"守恒运动"。位错攀移需要热激活,较滑移所需的能量更大,所以对大多数材料,在室温下很难进行位错的攀移,而在较高温度下,攀移较易实现。

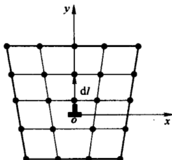


图 3.7　刃型位错的攀移

A　位错攀移的阻力(Resistance Force)

如图 3.7 所示，设刃型位错向上攀移 $\mathrm{d}l$ 距离，位错线方向垂直纸面向外。攀移时产生的体积变化为：

$$\Delta V = (\mathrm{d}\boldsymbol{s} \times \mathrm{d}\boldsymbol{l}) \cdot \boldsymbol{b}$$

其值为正表示材料增加，为负表示材料减少。对于单位长度位错线的体积变化为：

$$|\Delta V| = \mathrm{d}l \cdot b$$

令一个原子或一个空位的体积为 b^3，则产生体积变化 $|\Delta V| = \mathrm{d}l \cdot b$ 需要的空位数为：

$$\mathrm{d}N = \frac{|\Delta V|}{b^3} = \frac{\mathrm{d}l \cdot b}{b^3} = \frac{\mathrm{d}l}{b^2}$$

假设形成一个空位所需能量为 u_1，则刃型位错向上攀移 $\mathrm{d}l$ 距离，形成 $\mathrm{d}N$ 个空位所需的能量为：

$$\mathrm{d}u = \mathrm{d}N \cdot u_1 = \frac{\mathrm{d}l}{b^2} u_1$$

故位错攀移的阻力为：

$$F_c = \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}l} = \frac{u_1}{b^2}$$

因 u_1 很高，表明攀移是很困难的。

B　位错攀移的驱动力(Driving Force)

攀移运动虽然困难，但还是能够进行的。那么驱动力是什么呢？这必须了解攀移运动的特点。攀移运动要通过原子的迁移，要引起体积变化，而体积变化可由外加正应力和空位或间隙原子的聚集产生。因此攀移的驱动力可分为弹性攀移力和渗透力。

(1) 弹性攀移力(Climbing Force)

如图 3.8 所示，由式(3-38)得：

$$F_y = -b\sigma_{xx}$$

式中　F_y——沿 y 方向垂直滑移面的作用力；

b——位错强度；

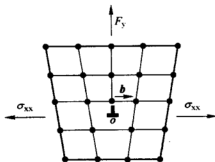


图 3.8　位错所受的弹性攀移力

σ_{xx}——与 b 平行的正应力分量，负号表示如果 σ_{xx}为拉应力，则体积增加，向下攀移，F_y 指向下；如果 σ_{xx}为压应力，则向上攀移，F_y 指向上。

(2) 渗透力(Penetrability)

晶体中的过饱和空位或间隙原子，它们将向位错线附近渗透，而聚集在位错线上，使位错线向上或向下攀移，这种力称为渗透力，它与空位或间隙原子的过饱和度(Degree Of Supersaturation)有关。

假设在某一温度下，晶体中空位的平衡浓度为 C_0，而实际浓度为 C(晶体中空位数 n 与原子总数 N 的比值)，且 C 大于 C_0，这就相当于空位形成能在位错附近由 u_1 降为 u'_1，也就是攀移的阻力由$\frac{u_1}{b^2}$降为$\frac{u'_1}{b^2}$，这个降低的阻力就是驱动力，并称为渗透力，用 F_s 表示。

$$F_s=\frac{u_1}{b^2}-\frac{u'_1}{b^2}=\frac{u_1-u'_1}{b^2}$$

已知：$n=Ne^{-\frac{u_1}{KT}}$(n 为肖特基缺陷浓度)，则平衡浓度

$$C_0=\frac{n}{N}=e^{-\frac{u_1}{KT}}=\exp\left(-\frac{u_1}{KT}\right)$$

同理可得：$C=e^{-\frac{u'_1}{KT}}=\exp\left(-\frac{u'_1}{KT}\right)$

两式取对数相减：

$$\ln C_0-\ln C=-\frac{u_1}{KT}+\frac{u'_1}{KT}=-\frac{u_1-u'_1}{KT}$$

$$u_1-u'_1=-KT\ln\frac{C_0}{C}$$

所以

$$F_s=-\frac{KT}{b^2}\ln\frac{C_0}{C}=\frac{KT}{b^2}\ln\frac{C}{C_0} \tag{3-1}$$

从上述分析可知，x 方向的正应力和渗透力为位错攀移的驱动力；而且温度越高，空位过饱和度越大，渗透力 F_s 越大，这表明温度越高并存在过饱和空位时，刃型位错易于产生攀移运动。

3.1.4 螺型位错的交滑移(Cross Slip)

对于螺型位错，由于所有包含位错线的晶面都可成为其滑移面，因

此，当某一螺型位错在原滑移面上运动受阻时，有可能从原滑移面转移到与之相交的另一滑移面上去继续滑移，这一过程称为交滑移。如果交滑移后的位错再转回和原滑移面平行的滑移面上继续运动，则称为双交滑移，如图 3.9 所示。

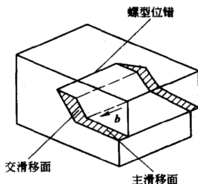


图 3.9　螺型位错的交滑移

面心立方晶体中的交滑移是由不同的{111}面沿同一<110>方向滑移，如图 3.10 所示，$[\bar{1}\,0\,1]$是$(1\,\bar{1}\,1)$和$(1\,1\,1)$两个密排面的共同方向。在$(1\,1\,1)$面上有一小位错环，$b=\frac{1}{2}[\bar{1}\,0\,1]$在切应力作用下，这个位错环不断扩大，位错线的方向是 *WXYZ*，*W* 处为正刃型位错，*Y* 处为负刃型位错，*X* 处为左螺型位错，*Z* 处为右螺型位错。如果应力适宜，当右螺型位错 *Z* 接近交线$[\bar{1}\,0\,1]$时，可转移到$(1\,\bar{1}\,1)$面上进行滑移，*A*、*B*、*C* 位置为交滑移，*D* 位置位错又回到$(1\,1\,1)$面上滑移，即为双交滑移。

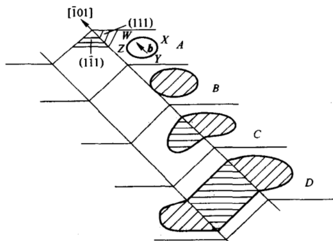


图 3.10　面心立方晶体中的双交滑移示意图

体心立方晶体中的螺型位错也有交滑移，它是{110}、{112}和{123}面同时沿<111>方向滑移，如纯铁的$(\bar{1}\,1\,0)$、$(1\,1\,\bar{2})$和$(2\,1\,\bar{3})$面可同时沿$[1\,1\,1]$方向滑移，见图 3.11 所示，$ab \parallel a'b' \parallel a''b'' \parallel [1\,1\,1]$，*ab* 为

(2 1 $\bar{3}$)面上的[1 1 1]方向；$a'b'$为(1 1 $\bar{2}$)面上的[1 1 1]方向；$a''b''$为($\bar{1}$ 1 0)面上的[1 1 1]方向。因此晶体中的滑移线常呈波浪形。

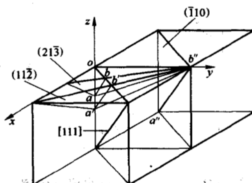


图 3.11 体心立方晶体中的交滑移

3.2 运动位错的交割(Dislocation Intersection)

当一位错在某一滑移面上运动时，会与穿过滑移面的其他位错交割。位错交割时会发生相互作用，这对材料的强化、点缺陷(Point Defect)的产生有重要意义。

在位错的滑移过程中，其位错线很难同时实现全长的运动，因而一个运动的位错线，特别是在受到阻碍的情况下，有可能通过其中一部分线段首先进行滑移。若由此形成的曲折线段在位错的滑移面上时，称为扭折(Kink)；若该曲折线段垂直于位错的滑移面时，称为割阶。扭折和割阶也可由位错之间的交割而形成。

3.2.1 两个柏氏矢量互相垂直(Vertical)的刃型位错交割

如图 3.12 所示，柏氏矢量为 $\boldsymbol{b}_1$ 的刃型位错 XY 和柏氏矢量为 $\boldsymbol{b}_2$ 的刃型位错 AB 分别位于两垂直的平面 P_{XY}、P_{AB}上，柏氏矢量 $\boldsymbol{b}_1$ 与 $\boldsymbol{b}_2$ 相互垂直。若 XY 向下运动与 AB 交割，由于 XY 扫过的区域，其滑移面 P_{XY}两侧的晶体将发生 $\boldsymbol{b}_1$ 距离的相对位移，因此交割后，在位错线 AB 上产生 PP'小台阶。显然，PP'的大小和方向取决于 $\boldsymbol{b}_1$。由于位错的柏氏矢量的守恒性，PP'的柏氏矢量仍为 $\boldsymbol{b}_2$，$\boldsymbol{b}_2$ 垂直于 PP'，因而 PP'是刃型位错，且不在原位错线的滑移面上，故是割阶。至于位错 XY，由于它平行 $\boldsymbol{b}_2$，因此交割后不会在 XY 上形成割阶。

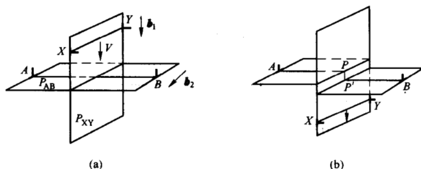


图 3.12　两个柏氏矢量互相垂直的刃型位错交割

(a) 交割前；(b) 交割后

3.2.2　两个柏氏矢量互相平行(Parallel)的刃型位错交割

如图 3.13 所示，柏氏矢量为 $\boldsymbol{b}_1$ 的刃型位错 XY 和柏氏矢量为 $\boldsymbol{b}_2$ 的刃型位错 AB 分别位于两垂直的平面 P_{XY}、P_{AB}上，柏氏矢量 $\boldsymbol{b}_1$ 与 $\boldsymbol{b}_2$ 相互平行。AB 不动，XY 向右运动，交割后，在 AB 位错线上出现一段平行于 $\boldsymbol{b}_1$ 的 PP'台阶，其大小和方向与 $\boldsymbol{b}_1$ 相同；在 XY 位错线上也出现一段平行于 $\boldsymbol{b}_2$ 的 QQ'台阶，其大小和方向与 $\boldsymbol{b}_2$ 相同。但它们的滑移面和原位错的滑移面一致，故称为扭折，属于螺型位错。在运动过程中，这种扭折在线张力的作用下可能被拉直而消失。

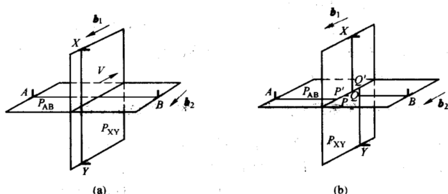


图 3.13　两个柏氏矢量互相平行的刃型位错交割

(a) 交割前；(b) 交割后

3.2.3　两个柏氏矢量垂直的刃型位错与螺型位错的交割

如图 3.14 所示，π_1、π'_1 为滑移面，AA'为刃型位错，其柏氏矢量为 $\boldsymbol{b}_1$，

BB'为螺型位错,其柏氏矢量为 b_2,BB'不动,AA'向左运动,交割后,在刃型位错 AA'上形成大小和方向与 b_2 相同的割阶 MM',其柏氏矢量为 b_1。由于该割阶的滑移面与原刃型位错 AA'的滑移面不同,因而当带有这种割阶的位错继续运动时,将受到一定的阻力。同样,交割后在螺型位错 BB'上也形成大小和方向与 b_1 相同的一段折线 NN',由于它垂直于 b_2,故属于刃型位错;又由于它位于螺型位错 BB'的滑移面上,因此 NN'为扭折。

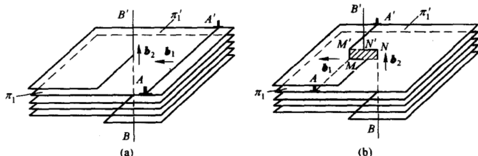


图 3.14 刃型位错与螺型位错的交割

(a) 交割前;(b) 交割后

3.2.4 两个柏氏矢量互相垂直的螺型位错交割

如图 3.15 所示,AA'为螺型位错,其柏氏矢量为 b_1,BB'也为螺型位错,其柏氏矢量为 b_2,BB'不动,AA'向左运动,交割后,在刃型位错 AA'上形成大小和方向与 b_2 相同的割阶 MM',其柏氏矢量为 b_1,其滑移面不在 AA'的滑移面上,是刃型割阶。同样在位错线 BB'上也形成一刃型割阶 NN'。这种刃型割阶都阻碍螺型位错的移动。

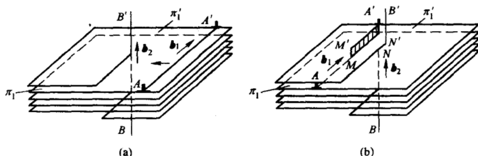


图 3.15 两个螺型位错的交割

(a) 交割前;(b) 交割后

综上所述,运动的位错交割后,每根位错线上都可能产生一扭折或割阶,其大小和方向取决于另一位错的柏氏矢量,但具有原位错线的柏氏矢量。所有的割阶都是刃型位错,而扭折可以是刃型也可以是螺型的。另外,扭折与原位错线在同一滑移面上,可随主位错线一起运动,几乎不产生阻力,而且扭折在线张力作用下易于消失。但割阶则与原位错线不在同一滑移面上,故除非割阶产生攀移,否则割阶就不能随主位错线一起运动,成为位错运动的障碍。

3.2.5　带割阶位错的运动

一条位错线与许多位错交割,则在该位错线上会形成许多割阶。带割阶位错的运动,按割阶高度不同可分为小、中、大三种类型。

A　小割阶

小割阶的高度一般只有 1～2 个原子间距。图 3.16 为带割阶的螺型位错的运动。螺型位错在滑移面上与其他位错交割,在其位错线上产生许多割阶,异号割阶反向运动,相互对消,最后只剩下同号割阶。同号割阶相互排斥,形成一定距离,最后在位错线上留下许多不可动割阶,如图 3.16(a)所示。当滑移面上受切应力作用时,由于不动割阶的阻碍作用,螺型位错被割阶钉扎而发生弯曲,如图 3.16(b)所示。只有增加滑移面上的切应力,才能克服弯曲位错线的向心恢复力,使弯曲位错线继续向前扩展。当切应力增加到一定程度时,螺型位错便会拖着不动割阶向前一起运动,但在割阶后面留下一串空位或间隙原子,如图 3.16(c)所示。

B　中割阶

中割阶的高度从几个到 20 个原子间距,这时位错不可能拖着割阶一起运动。当滑移面上作用的切应力大到一定值时,位错自己向前滑移,位错与割阶连结点 O、P 被拉长,形成两条符号相反的刃型位错线 OO' 与 PP',称为位错偶(Dislocation Couple),如图 3.17 所示。位错偶达到一定长度,即与原位错脱离,形成一个长位错环,并分裂成若干小的位错环。原位错又恢复到带割阶的原来状态。

C　大割阶

大割阶的长度在 20 个原子间距以上,它对位错线的钉扎作用更明显。由于割阶较长,割阶两端的位错相距较远,彼此间相互作用较小,在切应力作用下,它们可以在各自的滑移面上以割阶为轴而发生滑移运动,

如图 3.18 所示。

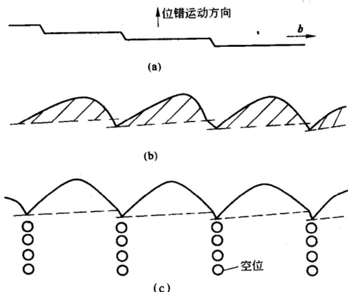


图 3.16 带割阶的螺型位错的运动

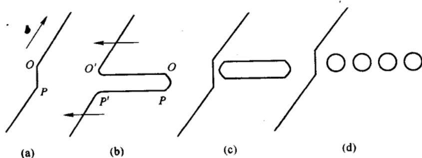


图 3.17 位错偶的形成过程

对刃型位错，其割阶与柏氏矢量所组成的面，一般都与原位错线的滑移方向一致，能与原位错一起运动。但此时割阶的滑移面并不一定是晶体的最密排面，故运动时割阶所受到的晶格阻力较大，但螺型位错的割阶阻力则相对要小得多。

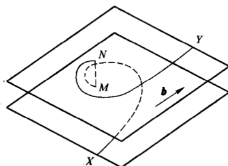


图 3.18 大割阶的运动

3.3 位错的增殖(Dislocation Multiplication)

从直观上看,位错在塑性变形中要不断地逸出晶体表面,使晶体中位错密度不断减少,然而事实恰恰相反,经剧烈变形后的金属晶体,其位错密度可增加 4~5 个数量级,这种现象充分说明晶体在变形过程中位错在不断地增殖,所以,位错的增殖机制(Multiplication Mechanism)是位错理论中一个很重要的问题。

位错的增殖机制有许多种,其中一种主要方式是弗兰克—瑞德(Frank-Read)位错源。图 3.19 表示弗兰克—瑞德源的位错增殖机制。若某一滑移面上有一段刃型位错 AB,它的两端被位错网节点钉住,不能运动。现沿位错的柏氏矢量方向加切应力,使位错沿滑移面向前进行滑移运动。但由于 AB 两端固定,所以只能使位错线发生弯曲,见图 3.19(b)所示。单位长度位错线所受的滑移力 $F_d = \tau b$,它总是与位错线本身垂直,所以弯曲后的位错线每一小段继续受到 F_d 的作用,会沿它的法线方向向外扩展,其两端则分别绕节点 A,B 发生回转,见图 3.19(c)所示。当两端弯出来的线段相互靠近时,如图 3.19(d)所示,由于两线段平行于柏氏矢量,但位错线方向相反,分别属于左螺型位错和右螺型位错,它们互相抵消,形成一闭合的位错环和位错环内的一小段弯曲的位错线。只要外加切应力继续作用,位错环便继续向外扩张,同时环内的弯曲位错在线张力作用下又被拉直,恢复到原始状态,并重复以前的运动,络绎不绝地产生新的位错环,从而造成位错的增殖,并使晶体产生可观的滑移量(Slippage)。

为了使弗兰克—瑞德源开动,外加切应力需克服位错线弯曲时线张力所引起的阻力。由位错线张力一节可知,外加切应力 τ 与位错线弯曲时的曲率半径 r 之间的关系为 $\tau = \frac{\mu b}{2r}$,即曲率半径越小,要求与之相平衡的切应力越大。从图 3.19 可以看出当 AB 弯成半圆形时,曲率半径最小,所需的切应力最大,此时 $r = \frac{L}{2}$,L 为 A 与 B 之间的距离,故使弗兰克—瑞德源开动的临界切应力为 $\tau_c = \frac{\mu b}{L}$。若外加切应力 $> \tau_c$,则位错环将继续向外扩张。

弗兰克—瑞德的位错增殖机制已为实验所证实,人们已在 Si、Cd、Al-Cu、Al-Mg 合金,不锈钢和氯化钾等晶体中直接观察到了弗兰克—瑞德源。

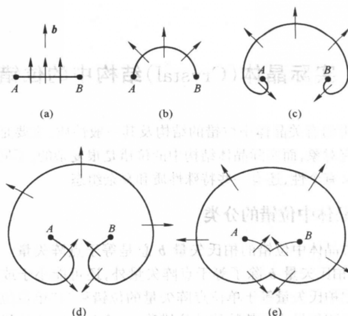


图 3.19 弗兰克—瑞德源的增殖过程

位错的增殖机制常见的还有双交滑移增殖机制,如图 3.20 所示。螺型位错经双交滑移后可形成刃型割阶,由于此割阶不在原位错的滑移面上,因此它不能随原位错线一起向前运动,即对原位错产生钉扎作用,并使原位错在滑移面上滑移时成为一个弗兰克—瑞德源。由于螺型位错线发生交滑移后形成了两个刃型割阶 AC 和 BD,因而使位错在新滑移面(1 1 1)上滑移时成为一个弗兰克—瑞德源。有时在第二个(1 1 1)面扩展出来的位错环又可以通过交滑移转移到第三个(1 1 1)面上进行增殖。从而使位错迅速增加,因此双交滑移增殖机制是比弗兰克—瑞德源更有效的增殖机制。

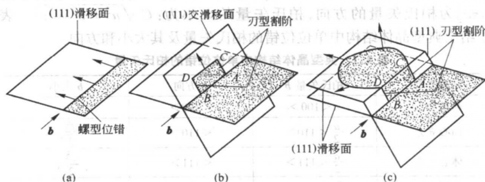


图 3.20 螺型位错双交滑移的增殖机制

4 实际晶体(Crystal)结构中的位错

前面所讲的有关晶体中位错的结构及其一般性质，主要是以简单立方晶体为研究对象，而实际晶体结构中的位错是很复杂的，不同类型的晶体既有共性又有个性，还有一些特殊性质和复杂组态。

4.1 实际晶体中位错的分类

简单立方晶体中位错的柏氏矢量 $\boldsymbol{b}$ 总是等于点阵矢量。但实际晶体中，位错的柏氏矢量 $\boldsymbol{b}$ 除了等于点阵矢量外，还可能小于或大于点阵矢量。通常把柏氏矢量等于单位点阵矢量的位错称为“单位位错”；把柏氏矢量等于点阵矢量或其整数倍的位错称为“全位错”，全位错滑移后晶体原子排列不变；把柏氏矢量不等于点阵矢量或其整数倍的位错称为“不全位错”，不全位错滑移后原子排列规律发生变化。

4.2 实际晶体中位错的柏氏矢量

实际晶体结构中，位错的柏氏矢量不能是任意的，它要符合晶体的结构条件和能量条件。晶体的结构条件是指柏氏矢量必须连接一个原子平衡位置到另一平衡位置。从能量条件看，由于位错能量正比于 b^2，b 越小越稳定，即单位位错是最稳定的位错。

柏氏矢量 $\boldsymbol{b}$ 的大小和方向用 $\boldsymbol{b} = C[uvw]$ 表示，其中：C 为常数，$[uvw]$ 为柏氏矢量的方向，柏氏矢量的大小为：$C\sqrt{u^2+v^2+w^2}$。表 4.1 给出典型晶体结构中单位位错的柏氏矢量及其大小和方向。

表 4.1 典型晶体结构中单位位错的柏氏矢量

结构类型	柏氏矢量 b	b 方向	b 大小
简单立方	$a\langle 100\rangle$	$\langle 100\rangle$	a
面心立方	$\frac{a}{2}\langle 110\rangle$	$\langle 110\rangle$	$\frac{\sqrt{2}}{2}a$
体心立方	$\frac{a}{2}\langle 111\rangle$	$\langle 111\rangle$	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$
密排六方	$\frac{a}{3}\langle 11\bar{2}0\rangle$	$\langle 11\bar{2}0\rangle$	a

4.3 位错反应(Dislocation Reaction)

位错反应就是位错的合并(Merging)与分解(Dissociation),即晶体中不同柏氏矢量的位错线合并为一条位错线或一条位错线分解成两条或多条柏氏矢量不同的位错线。

位错使晶体点阵发生畸变,柏氏矢量是反映位错周围点阵畸变总和的参数。因此,位错的合并实际上是晶体中同一区域两个或多个畸变的叠加,位错的分解是晶体内某一区域具有一个较集中的畸变,松弛为两个或多个畸变。

位错反应能否进行,取决于是否满足下列两个条件:

A 几何条件

根据柏氏矢量 $\boldsymbol{b}$ 的守恒性,反应后诸位错的柏氏矢量 $\boldsymbol{b}_k$ 之和应等于反应前诸位错的柏氏矢量 $\boldsymbol{b}_i$ 之和,即

$$\sum \boldsymbol{b}_i = \sum \boldsymbol{b}_k \tag{4-1}$$

B 能量条件

从能量角度要求,位错反应必须是一个伴随着能量降低的过程。由于位错的能量正比于其柏氏矢量的平方,所以,反应后各位错的能量之和应小于反应前各位错的能量之和,即

$$\sum b_i^2 > \sum b_k^2 \tag{4-2}$$

分析位错反应时,一般先用几何条件确定位错反应是否可以进行,然后再利用能量条件来判定位错反应的方向。

例 4-1 $a[1\,0\,0] \longrightarrow \frac{a}{2}[1\,1\,1] + \frac{a}{2}[1\,\bar{1}\,\bar{1}]$

能量条件: $\boldsymbol{b}$	$\boldsymbol{b}_1$	$\boldsymbol{b}_2$	几何条件: $a = \frac{a}{2} + \frac{a}{2}$
b: a	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	$0 = \frac{a}{2} - \frac{a}{2}$
b^2: a^2	$\frac{3}{4}a^2$	$\frac{3}{4}a^2$	$0 = \frac{a}{2} - \frac{a}{2}$

从几何条件看: $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_2$,满足;从能量条件看: $a^2 < \frac{3}{2}a^2$,不满足,所以反应不能进行。

例 4-2 $a[1\,0\,0] + a[0\,1\,0] \longrightarrow \frac{a}{2}[1\,1\,1] + \frac{a}{2}[1\,1\,\bar{1}]$

能量条件:	$\boldsymbol{b}_1$	$\boldsymbol{b}_2$	$\boldsymbol{b}_3$	$\boldsymbol{b}_4$
b:	a	a	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$
b^2:	a^2	a^2	$\frac{3}{4}a^2$	$\frac{3}{4}a^2$

几何条件：$a+0=\frac{a}{2}+\frac{a}{2}$

$$0+a=\frac{a}{2}+\frac{a}{2}$$

$$0+0=\frac{a}{2}-\frac{a}{2}$$

从几何条件看：$\boldsymbol{b}_1+\boldsymbol{b}_2=\boldsymbol{b}_3+\boldsymbol{b}_4$，满足；从能量条件看：$2a^2>\frac{3}{2}a^2$，也满足，所以反应可以进行。

4.4　面心立方晶体(Face-centered Cubic Crystal)中的位错

4.4.1　堆垛层错(Stacking Fault)

各种晶体结构的完整晶体都可以看成是由许多结构相同的原子面按一定规则堆垛而成的，其中原子密排面的堆垛对研究问题是最有用的。

图 4.1 是面心立方晶体密排面(111)的正常堆垛示意图。在面心立方晶胞中，表示了 A、B、C 三个相邻的(111)面上的原子分布。(a)、(b)、(c)三图分别表示了 A 层、AB 两层及 ABC 三层原子面的堆垛情况。如果把原子中心投影到(111)面，可见三层相邻面上的原子中心在(111)面上的投影位置并不相同，如图 4.1(c)所示。底层为 A 层，▼表示 B 层原子中心的投影位置，▲表示 C 层原子中心的投影位置。如果把单位晶胞(Unit Cell)中通过坐标原点 O 的(111)面上的原子，也作如上投影，那么可以看到，该面上原子中心投影位置与 C 层原子中心投影位置是相同的。由于晶体点阵的对称性和周期性，面心立方晶体(111)密排面上的原子在该面上的投影位置是按 A、B、C 三个原子面的原子投影位置进行周期变化的。可以记为：$ABCABCA...$，这就是面心立方晶体密排面的正常堆垛顺序。如果用记号△表示原子面以 AB、BC、$CA...$ 顺序堆垛，▽表示相反的顺序，如 BA、AC、$CB...$，那么面心立方晶体密排面的正常堆垛又可以表示为：△△△△△，如图 4.1(d)所示。

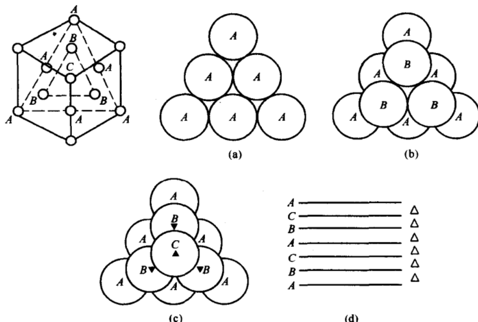


图 4.1 面心立方晶体中(111)面的正常堆垛

实际晶体结构中,密排面的正常堆垛顺序有可能遭到破坏和错排,称为堆垛层错,简称层错。图 4.2 表示面心立方晶体形成堆垛层错的方式。若将正常堆垛顺序变成 $ABC\uparrow BCA\ldots$(即△△▽△△...),其中箭头所指相当于抽出一层原子面(A 层),故称为抽出型层错,如图 4.2(a)所示。相反,若在正常堆垛顺序中插入一层原子面(B 层),即可表示为 $ABC\downarrow B\downarrow ABC\ldots$,相当于抽出 A、C 两层,可表示为 $ABC\uparrow B\uparrow ABC\ldots$(即△△▽▽△△...),其中箭头所指的为插入 B 层后所引起的二层错排,称为插入型层错,如图 4.2(b)所示。两者对比结果,可见一个插入型层错相当于两个抽出型层错。

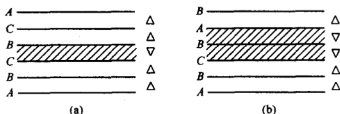


图 4.2 面心立方晶体中的堆垛层错

(a) 抽出型;(b) 插入型

形成层错时几乎不产生点阵畸变,但它破坏了晶体的完整性和正常的周期性,使电子发生反常的衍射效应,故使晶体的能量有所增加,这部分增加的能量称为堆垛层错能,用 γ 表示。从能量的观点来看,晶体中出现层错的几率与层错能有关,层错能越高,则出现层错的几率越小。如在层错能很低的奥氏体不锈钢中,常可看到大量的层错,而在层错能高的铝中,就看不到层错。

4.4.2　不全位错(Partial Dislocation)

若堆垛层错不是发生在晶体的整个原子面上而只是部分区域存在,那么,在层错与完整晶体的交界处就存在柏氏矢量不等于点阵矢量的不全位错,如图 4.3 所示。在面心立方晶体中有两种重要的不全位错:肖克莱(Shockley)不全位错和弗兰克(Frank)不全位错。

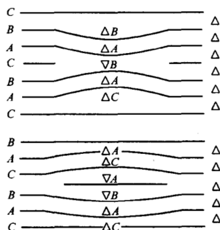


图 4.3　层错的边界示意图

A　肖克莱不全位错

图 4.4 为肖克莱不全位错的刃型结构。上半图是面心立方晶体的$(0\bar{1}1)$面,圆圈代表前一个面上原子排列的位置,黑点代表后一个面上原子排列的位置。原子的连线看起来似乎是一个平面上的菱形,实际上是一前一后两个平面上相邻原子的连线。下半图是把上半图中 *A* 层与 *C* 层在(111)面上作投影。分层使用了不同的符号,□代表 *A* 层,原子呈密排,△代表紧接 *A* 层之下的 *C* 层,也是密排的。让 *A* 层的右半部滑移至 *B* 层原子的位置,其上部的各层也跟着移动,但滑移只限于一部分原子,即右半部原子。于是右半部的滑移面上发生了层错,左半部则没有移动,所以也没有层错,在两者的交界处发生了原子的严重错排,图中滑移后的原子位置用虚线连接。不全位错可以认为就在上半部的图中的 *A* 层上的两个星号之间,此时在下半图上看到对应的滑移后的 *A* 层原子位置,在用虚线连接起来的六角形中,越接近位错的部分畸变越大。

上半图中左边的晶体按 *ABCABC*... 正常顺序堆垛,而右边晶体是按 *ABCBCAB*... 顺序堆垛,即有层错存在,层错与完整晶体的边界就是肖克莱位错,它位于一个平面上。图中下半部的右上角处的箭头符号即

为不全位错的柏氏矢量 $\boldsymbol{b}=\frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}]$,它与位错线互相垂直,因此它是纯刃型的肖克莱不全位错。

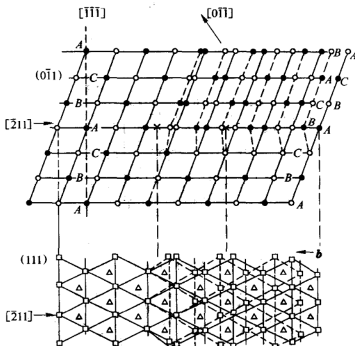


图 4.4 面心立方晶体中的纯刃型肖克莱不全位错

根据其柏氏矢量与位错线的夹角关系,它既可以是纯刃型的,也可以是纯螺型的,见图 4.5,实线相连的位置代表滑移前的位置,虚线相连的代表滑移后的位置,滑移只在图中下半部进行,交界区域则是一段纯螺型的肖克莱不全位错。

肖克莱位错还可以是混合型的,见图 4.6。肖克莱不全位错可以在其所在的{111}面上滑移,滑移的结果使层错扩大或缩小,但是即使是纯刃型的肖克莱不全位错也不能攀移,这是因为它有确定的层错相连,若进行攀移,势必离开此层错面,故不可能进行。

B 弗兰克不全位错

图 4.7 为抽出半层密排面形成的弗兰克不全位错。抽去 B 层的右边一部分而让其上面的 C 层垂直落下来,由于 B 层的右边部分抽去而左边部分没有抽去,靠近层错的边沿位置的原子畸变大,但远离边沿的原子由于垂直落下,故原子排列虽发生层错,但仍处于密排位置,并不发生畸

变。这些畸变处的原子即组成不全位错。

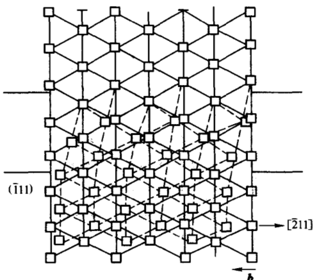


图 4.5　面心立方晶体中的纯螺型肖克莱不全位错

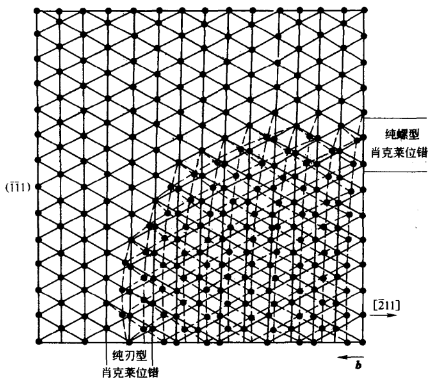


图 4.6　面心立方晶体中的混合型肖克莱不全位错

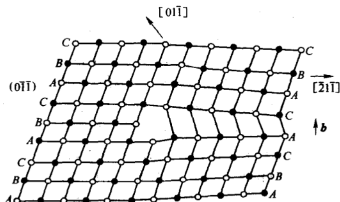


图 4.7 抽出半层密排面形成的弗兰克不全位错

图 4.8 为插入半层密排面形成的弗兰克不全位错。在右半部的 A、B 层之间插入一部分 C 层原子,构成不全位错。

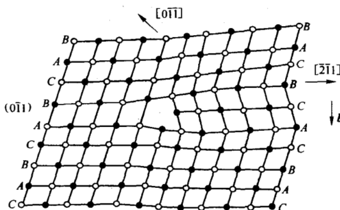


图 4.8 插入半层密排面形成的弗兰克不全位错

与抽出型层错相联系的不全位错称为负弗兰克不全位错,而与插入型层错相联系的不全位错称为正弗兰克不全位错。它们的柏氏矢量都属于$\frac{a}{3}\langle 111\rangle$,且都垂直于层错面$\{111\}$,但方向相反。弗兰克不全位错属纯刃型位错,这种位错不能在滑移面上进行滑移运动,否则将使其离开所在的层错面,但能通过点缺陷的运动沿层错面进行攀移,使层错面扩大或缩小,所以弗兰克不全位错又称不滑动位错或固定位错,而肖克莱不全位错则属于可动位错。

C　两种不全位错的特征

不全位错的一个重要特征就是它的柏氏矢量。求不全位错的矢量方法和求全位错的矢量方法相似。首先,设定一个位错线的方向,如从纸后走向纸面。然后,环绕这个不全位错做一个柏氏回路,回路的方向服从右手螺旋法则。但必须注意不全位错所在晶体中的回路必须从堆垛层错上出发,而在全位错的晶体中的回路却可以从任何点出发,只要不碰到缺陷即可。图 4.9 为肖克莱不全位错,可见作为参考的完整晶体的回路的最后一步,就是肖克莱位错的矢量。肖克莱位错的矢量方向只与滑移面的上半晶体受压或受张情况有关,而与层错位于位错线之左或之右无关。

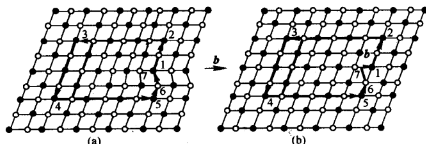


图 4.9　肖克莱刃型位错的柏氏回路和矢量

图 4.10 为正弗兰克不全位错,图中画的是一个堆垛层错在位错线之右的刃型位错,柏氏矢量方向向下,即 $\boldsymbol{b}=-\frac{1}{3}[1\ 1\ 1]$。若堆垛层错在位错线之左,则柏氏矢量方向向上,即 $\boldsymbol{b}=+\frac{1}{3}[1\ 1\ 1]$。应当指出,在图 4.10 的完整晶体中,柏氏回路自 1 走到 6 后,并不是把 6 与 1 直接连接起来,因为在有位错的晶体中,6 至 1 的连线与 1 至 2 的连线对称于通过 1 的水平线,所以在参考晶体中也要使 6 至 7 的连线和 1 至 2 的连线成为对称,于是最终代表柏氏矢量的从 7 至 1 的闭合线段为垂直于水平方向的线 $-\frac{1}{3}[1\ 1\ 1]$。同理,也可以求得负弗兰克位错的柏氏矢量。

总结不全位错的柏氏矢量的特点如下:

1) 不全位错的四周不完全是完整的结构,有一部分有层错;
2) 不全位错的柏氏回路必须从层错开始,回路最后还要穿过层错;
3) 不全位错的柏氏矢量不是完整的最短点阵矢量;
4) 不全位错的矢量也有守恒性。

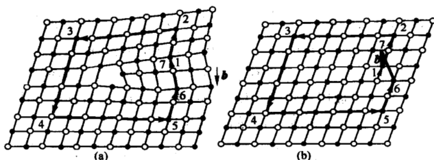


图 4.10 正弗兰克位错的柏氏回路和矢量

两种不全位错都只能在层错面上存在,它们的运动也限制在这个面上。肖克莱位错可以滑移,但不能攀移;弗兰克位错则相反。但要注意,纯螺型的肖克莱位错不能交滑移,只能在层错面上滑移。弗兰克位错只有刃型的,其柏氏矢量与滑移面垂直,只能攀移,而且是在密排面上攀移,而不是垂直于密排面攀移。面心立方晶体中两种不全位错的特征见表 4.2。

表 4.2 面心立方晶体中两种不全位错的特征

位错种类	肖克莱位错	弗兰克位错	
		正	负
形成位错的方法	在{111}面上做不均匀滑移	插入一片{111}	抽去一片{111}
位错型	刃、螺、混合型	刃型	
柏氏矢量	在{111}中,$b=\frac{1}{6}<112>$	垂直于{111},$b=\frac{1}{3}<111>$	
位错线	在{111}上,任意形(混合型)	在{111}面上,任意形(刃型)	
运动方式	滑移,不攀移、不交滑移	攀移,不滑移	

4.4.3 扩展位错(Extended Dislocation)

A 汤普森(Thompson)记号

汤普森在 1953 年引入了一个基本的参考四面体和一组记号,能表示出面心立方晶体中所有重要位错的柏氏矢量及位错的几何关系。

如图 4.11 所示,在面心立方点阵中取出单位晶胞的$\frac{1}{8}$小四面体,见图 4.11(a)。将 D 取在单位晶胞的原点(0,0,0),A 取在$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$,$B$

取在($\frac{1}{2}$,0,$\frac{1}{2}$),C 取在(0,$\frac{1}{2}$,$\frac{1}{2}$)。以 A,B,C,D 为顶点连成一个由 4 个{111}面组成的,且其边平行于<110>方向的四面体,这就是汤普森四面体。如果以 $\alpha,\beta,\gamma,\delta$ 分别代表与 A,B,C,D 点相对面的中心,见图 4.11(b)。把 4 个面以三角形 ABC 为底展开,得图 4.11(c)。由图可知:

1) 四面体的 4 个面为{111}晶面族构成。

2) 四面体的 6 个棱边代表 12 个$\frac{1}{2}$<110>晶向,即为面心立方晶体中 12 个全位错的柏氏矢量。

3) 每个面的顶点与其中心的连线代表 24 个$\frac{1}{6}$<112>型的滑移矢量,相当于面心立方晶体中的 24 个肖克莱不全位错的柏氏矢量。

4) 4 个顶点到它所对的三角形中点的连线代表 8 个$\frac{1}{3}$<111>型的滑移矢量,相当于面心立方晶体中的 8 个弗兰克不全位错的柏氏矢量。

5) 4 个面中心相连即 $\alpha\beta,\alpha\gamma,\alpha\delta,\beta\gamma,\gamma\delta,\beta\delta$ 为$\frac{1}{6}$<110>型的压杆位错。

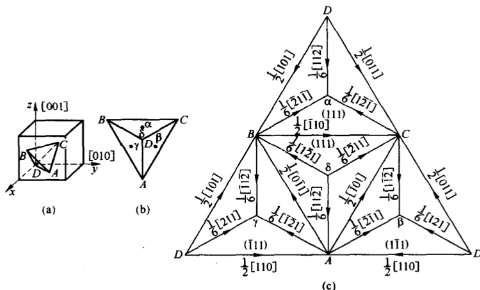


图 4.11　汤普森四面体及记号

有了汤普森四面体,面心立方晶体中各类位错反应尤其是复杂的位错反应都可极为简便地用相应的汤普森记号来表达。前面已讲过位错反

应,这里应用汤普森记号再举几个例子。

(1) $\frac{a}{2}[1\,0\,1] \rightarrow \frac{a}{6}[2\,1\,1] + \frac{a}{6}[1\,\bar{1}\,2]$

几何条件为:$\overrightarrow{DB} \rightarrow \overrightarrow{D\gamma} + \overrightarrow{\gamma B}$,能量条件为:$\frac{a^2}{2} > \frac{a^2}{6} + \frac{a^2}{6}$,均满足,能反应。

(2) $\frac{a}{2}[0\,1\,1] + \frac{a}{2}[1\,\bar{1}\,0] \rightarrow \frac{a}{2}[1\,0\,1]$

几何条件为:$\overrightarrow{DC} + \overrightarrow{CB} \rightarrow \overrightarrow{DB}$,能量条件为:$\frac{a^2}{2} + \frac{a^2}{2} > \frac{a^2}{2}$,均满足,能反应。

(3) $\frac{a}{6}[1\,2\,\bar{1}] + \frac{a}{6}[\bar{1}\,\bar{1}\,2] \rightarrow \frac{a}{6}[0\,1\,1]$

几何条件为:$\overrightarrow{\gamma A} + \overrightarrow{A\delta} \rightarrow \overrightarrow{\gamma\delta}$,能量条件为:$\frac{a^2}{6} + \frac{a^2}{6} > \frac{a^2}{18}$,均满足,能反应。

B 扩展位错

面心立方晶体中能量最低的全位错是处在{111}面上的柏氏矢量为$\frac{a}{2}$<110>的单位位错。若单位位错 $\boldsymbol{b} = \frac{a}{2}[\bar{1}\,1\,0]$在切应力作用下沿着(111)晶面的$[\bar{1}\,1\,0]$方向滑移时,则原子从 B_1 位置滑动到相邻的 B_2 位置,需要越过A层原子的"高峰",这需要提供较高的能量,见图4.12。

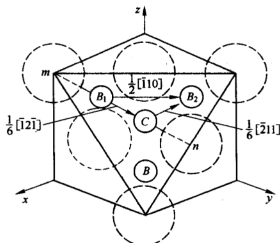


图4.12 全位错$\frac{a}{2}[\bar{1}\,1\,0]$分解示意图

但如果滑移分为两步，先从 B_1 位置沿 A 原子间的“低谷”滑移到邻近的 C 位置，即 $\boldsymbol{b}_1=\frac{1}{6}[\bar{1}\,2\,\bar{1}]$；然后再由 C 位置滑移到 B_2 位置，即 $\boldsymbol{b}_2=\frac{1}{6}[\bar{2}\,1\,1]$，这种滑移比较容易。显然，第一步滑移造成了层错，层错区与正常区之间必然会形成两个不全位错。也就是说，全位错的运动由两个不全位错的运动来完成，即 $\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}_1+\boldsymbol{b}_2$。

这个位错反应从几何条件和能量条件来判断均是可行的，如下所示：

$$\frac{a}{2}[\bar{1}\,1\,0]\rightarrow\frac{a}{6}[\bar{1}\,2\,\bar{1}]+\frac{a}{6}[\bar{2}\,1\,1]$$

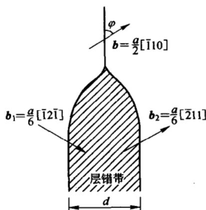


图 4.13　面心立方晶体中的扩展位错

几何条件为：$\overrightarrow{BC}\rightarrow\overrightarrow{B\delta}+\overrightarrow{\delta C}$，能量条件为：$\frac{1}{2}a^2>\frac{1}{3}a^2$，均满足，能反应。

通常把一个全位错分解为两个不全位错，中间夹着一个堆垛层错的位错组态称为扩展位错，图 4.13 即为$\frac{a}{2}[\bar{1}\,1\,0]$扩展位错的示意图。

扩展位错的宽度 d 就是扩展位错中层错区的宽度。它可以根据两个肖克莱不全位错间的斥力与位错的层错能平衡求得：

$$d=\frac{\mu b^2}{8\pi\gamma}\frac{2-\nu}{1-\nu}\left(1-\frac{2\nu}{2-\nu}\cos\varphi\right)=K\frac{\mu b^2}{8\pi\gamma}\tag{4-3}$$

式中　K——与全位错类型有关的常数；

φ——全位错线与它的柏氏矢量之间的夹角；

γ——层错能。

由(4-3)式可知，扩展位错的宽度与晶体的切变模量 μ 和位错的柏氏矢量 $\boldsymbol{b}$ 成正比，与单位面积层错能 γ 成反比。即层错能越大，扩展位错的宽度越小。具有面心立方结构的不同金属它们的层错能是不同的。例如，铝的层错能很高，故其扩展位错的宽度很窄，仅 1～2 个原子间距，实际上可认为铝中不会形成扩展位错；而奥氏体不锈钢的层错能很低，其扩展位错的宽度可达十几个原子间距。

当一个螺型单位位错分解为扩展位错后，由于两个肖克莱不全位错

不能离开层错面，因而扩展位错要实现交滑移首先必须束集成单位位错，然后才能进行交滑移。图 4.14 为扩展位错的交滑移过程。扩展位错的束集不是在整条位错线上同时进行，而是先在位错线上某点 A 开始，然后扩展成一线段 AA'，被束集的单位位错进行交滑移，并且在新的滑移面上重新扩展，继续滑移，逐步把扩展位错转移到新的滑移面上。从扩展位错交滑移可知，层错能低的金属，扩展位错宽度大，束集困难，不易交滑移；而层错能高的铝，扩展位错宽度小，束集容易，因而很容易交滑移。

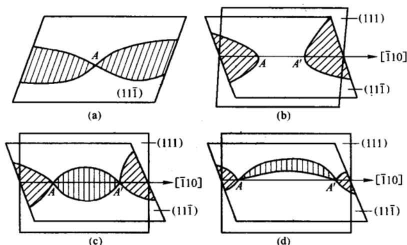


图 4.14 扩展位错的交滑移过程

4.4.4 面角位错(Lomer-Cottrell Dislocation)

在面心立方晶体中两个滑移面上各有一个单位位错，它们滑移相遇后发生位错反应，形成一个不动的位错群。这个位错群在晶体中成为位错运动的障碍，它对金属的加工硬化及断裂有着重要的影响。

如图 4.15 所示，在(111)和($\bar{1}$1 1)面上分别有两个全位错$\frac{a}{2}[\bar{1}\ 1\ 0]$和$\frac{a}{2}[1\ 0\ 1]$，它们在各自的滑移面分解为扩展位错：

$$\frac{a}{2}[\bar{1}\ 1\ 0]\rightarrow\frac{a}{6}[\bar{2}\ 1\ \ 1]+\frac{a}{6}[\bar{1}\ 2\ \bar{1}]，即\overrightarrow{BC}\rightarrow\overrightarrow{B\delta}+\overrightarrow{\delta C}$$

$$\frac{a}{2}[1\ 0\ 1]\rightarrow\frac{a}{6}[2\ 1\ 1]+\frac{a}{6}[1\ \bar{1}\ 2]，即\overrightarrow{DB}\rightarrow\overrightarrow{D\gamma}+\overrightarrow{\gamma B}$$

两个扩展位错各在自己的滑移面上相向移动，当每个扩展位错中的一

个领先不全位错达到滑移面的交线时，就会通过位错反应，生成新的位错：

$$\frac{a}{6}[\bar{1}\,2\,\bar{1}]+\frac{a}{6}[1\,\bar{1}\,2]\rightarrow\frac{a}{6}[0\,1\,1]，即\overrightarrow{\gamma B}+\overrightarrow{B\delta}\rightarrow\overrightarrow{\gamma\delta}。$$

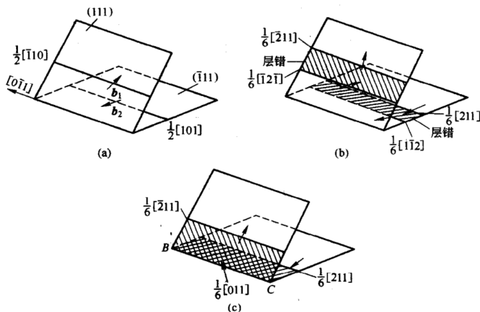


图 4.15 面角位错的形成过程

这个新位错$\frac{a}{6}[0\,1\,1]$是纯刃型的，其柏氏矢量位于(100)滑移面上，但面心立方晶体的滑移面是{111}，不易滑移，只能攀移。因此，这个位错是固定位错，又称压杆位错。压杆位错带着两片分别位于(111)和($\bar{1}$ 1 1)面上的层错区，以及$\frac{a}{6}[\bar{2}\,1\,1]$和$\frac{a}{6}[2\,1\,1]$两个不全位错。这种形成于两个{111}面之间的面角上，由三个不全位错和两片层错所构成的位错组态称为面角位错，也称为罗曼—柯垂尔(Lomer-cottrell)位错。

$$\frac{a}{2}[\bar{1}\,1\,0]+\frac{a}{2}[1\,0\,1]\rightarrow\frac{a}{6}[\bar{2}\,1\,1]+\frac{a}{6}[0\,1\,1]+\frac{a}{6}[2\,1\,1]$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{a}{2}[0\,1\,1]，即\overrightarrow{DC}\rightarrow\overrightarrow{D\gamma}+\overrightarrow{\alpha\gamma}+\overrightarrow{\delta\gamma}$$

4.5 体心立方晶体(Body-centered Cubic Crystal)中的位错

在体心立方晶体中以密排方向<111>为滑移方向，全位错的柏氏矢

量为$\frac{1}{2}<111>$,相应的滑移面有{110}、{112}、{123}。由于这三种滑移面均含有相同的$<111>$方向,使螺型位错易于交滑移。在低温变形的体心立方结构金属中,所观察到的位错多为长而直的螺型位错。这说明,同刃型位错相比,螺型位错的可动性较差,是控制体心立方结构金属滑移特性的主要位错组态。

4.5.1 全位错的合成反应(Synthetic Reaction of Perfect Dislocation)

在体心立方晶体中常见的全位错除了$\frac{a}{2}<111>$位错外,还有柏氏矢量为$a<001>$的位错,有时可在位错网络中观察到。$a<001>$型全位错可由两个$\frac{a}{2}<111>$型全位错经合成反应而获得,即

$$\frac{a}{2}[\bar{1}\,\bar{1}\,1]+\frac{a}{2}[1\,1\,1]\rightarrow a[0\,0\,1]$$

如图4.16所示,若沿(101)面上具有柏氏矢量为$\frac{a}{2}[\bar{1}\bar{1}\,1]$的位错与沿$(10\bar{1})$面上的具有柏氏矢量为$\frac{a}{2}[1\,1\,1]$的位错相遇时,便可按上述反应合成新位错使弹性性能降低。合成的新位错线沿着两滑移面(101)和$(10\bar{1})$的交线[0 1 0]方向,而柏氏矢量为$a[0\,0\,1]$,故为刃型位错。显然在体心立方晶体中,$a[0\,0\,1]$位错是一种不动位错,其相应的半原子面又恰好沿着解理面(001),易于成为萌生解理裂纹(Cleavage Crack)的部位,如图4.16(b)所示。

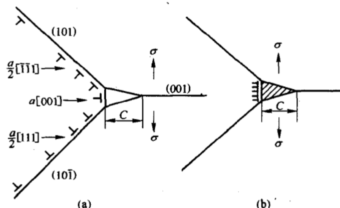


图4.16 [001]全位错的形成与解理裂纹成核

4.5.2　层错(Stacking Fault)

在体心立方晶体中,以{110}面的密排程度最大,故可以把体心立方晶体看成是由{110}面堆垛而成。如图4.17所示,两个相邻的($\bar{1}10$)面上原子的堆垛次序为 $AB\,AB\,AB\cdots$,两层一循环。在每一层上,原子之间空隙较大,其密排程度不如面心立方晶体和密排六方晶体中密排面紧凑。同时,可供第二层原子占据的 B 位置或 A 位置为马鞍型凹窝。在凹窝中心两侧$\frac{1}{8}[1\ 1\ 0]$处各有两个同等稳定的位置 B_1 和 B_2(或 A_1 和 A_2),都是 B 层原子(或 A 层原子)可以占据能量的极小处,从而为形成层错提供了可能性。显然,若将某一 B 层原子的位置向凹窝中心 B_1 或 B_2 错动$\frac{1}{8}[1\ 1\ 0]$时,便可得到两种滑移型层错:

$$\cdots AB\,AB\,AB_1\,AB_1\,AB_1\cdots\text{或}\cdots AB\,AB\,AB_2\,AB_2\,AB_2\cdots \tag{4-4}$$

但是,在以($\bar{1}10$)面堆垛时,每一层 A 原子上只有一种可供选择的 B 位置,故难以形成抽出型或插入型层错。如抽出或插入一层 B 原子,会造成 AA 型堆垛,使能量增高。

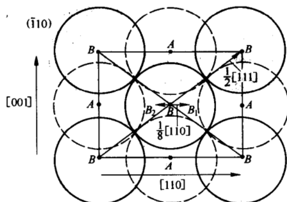


图4.17　($\bar{1}10$)面上相邻两层原子的分布图

在体心立方晶体中,还有一种在{112}面上形成层错的可能性。{112}面是体心立方晶体中最常见到的滑移面,也是孪晶面(Twinning Plane),为形成层错提供了有利条件。但{112}不是密排面,不能按刚球密堆方式逐层堆垛,如图4.18(a)所示。若沿[$\bar{1}$ $\bar{1}$ 0]方向观察时,可将

$(1\bar{1}2)$面上各原子在(110)面上的投影示于图 4.18(b)。图中标以 A、C 的原子位于(110)面上，用"○"表示；而标以 B、D 和 F 的原子沿$[\bar{1}\,\bar{1}\,0]$方向与(110)面相距$\frac{\sqrt{2}}{2}a$，用"□"表示。可见$(1\bar{1}2)$面的堆垛特点是每六层为一循环周期，即

$$\cdots ABCDEF\ ABCDEF\ AB\cdots \tag{4-5}$$

而且，由于相邻两层$(1\bar{1}2)$面上的原子沿$[\bar{1}\,\bar{1}\,0]$方向高度不同，又可将体心立方晶体的堆垛特点按$(1\bar{1}2)$面的堆垛周期中每两层为一组加以描述：

$$\cdots A_1\,A_2\,B_1\,B_2\,C_1\,C_2\,A_1\,A_2\,B_1\,B_2\,C_1\,C_2\,A_1\,A_2\cdots \tag{4-6}$$

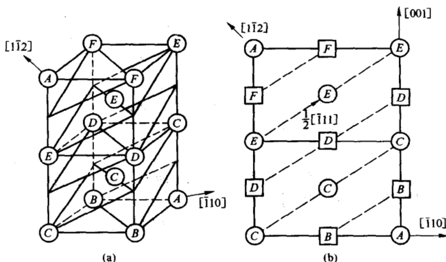


图 4.18 $(1\bar{1}2)$面上的原子分布及其堆垛特点

(a) $(1\bar{1}2)$面上原子的分布；(b) $(1\bar{1}2)$面上原子在(110)面上的投影

根据以上{112}面的堆垛特点，可有以下三种方式在体心立方晶体中形成层错。

A 滑移方式

由图 4.18 可知，$(1\bar{1}2)$面与(110)面相交，其交线$[\bar{1}\,1\,1]$恰好为滑移方向。每相邻两层$(1\bar{1}2)$面原子之间的相对滑移矢量为$\frac{1}{6}[\bar{1}\,1\,1]$，如图 4.19 所示。若将某一层$(1\bar{1}2)$面原子(如 A 层原子)以上部分相对于以下的 F 层滑移$\frac{1}{6}[\bar{1}\,1\,1]$或$\frac{1}{3}[1\,\bar{1}\,\bar{1}]$，可将体心立方晶体的堆垛次序变化

而形成 I_1 型内禀层错：

$$I_1 = \cdots FEDCBAFE^+ \vdots {}^+ FEDCBA\cdots \qquad (4\text{-}7)$$

显然，这种堆垛次序的变动相当于形成了一个原子层厚的孪晶。这也说明，在体心立方晶体中，孪晶易于在{112}面上形成。

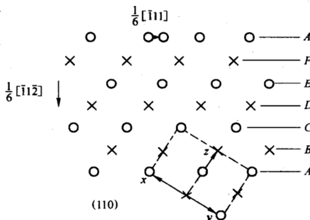


图 4.19　原子在(110)面上的投影

(○代表位于纸面上的原子；×代表位于纸面下的原子)

B　抽出方式

若在体心立方晶体的正常堆垛周期中，抽出一对原子层(如 C 层和 D 层)，可形成如下 I_2 型内禀层错：

$$I_2 = \cdots FEDCBAFE^+ \vdots {}^+ BAFEDCBA\cdots \qquad (4\text{-}8)$$

C　插入方式

若在体心立方晶体中的正常堆垛周期中，在某一 B 面处将晶体切开后，使其上各层原子向上沿$[1\bar{1}2]$方向移动$\frac{1}{3}[1\bar{1}2]$距离，再在该空隙中插入一对原子层(如 E 层和 F 层)，则可形成 E 型外延层错：

$$E = \cdots CDEFABE^+ \vdots {}^+ FCDEFABC\cdots \qquad (4\text{-}9)$$

在上述改变{112}面堆垛次序的过程中，要相应破坏或变动相邻原子层的键合状态。按照所涉及的原子键合破坏的程度，可以认为，I_1 型内禀层错所需能量最小，而形成其他两种层错所需能量较大。因此在体心立方晶体中，层错一般以 I_1 型为主，其他两种层错的实用意义不大。

4.5.3　不全位错

在体心立方晶体中可能形成的不全位错主要有：

1) 在{110}面上形成一部分层错时,其边界为不全位错$\frac{1}{8}<110>$;

2) 在{112}面上形成一部分层错时,其边界为不全位错$\frac{1}{6}<111>$或$-\frac{1}{3}<111>$。

另外,在体心立方晶体中,也可能在 I_1 型层错的基础上进一步形成 I_3 型层错,与其相对应的{112}面的堆垛次序如下:

$$I_3 = \cdots FEDCBAF\overset{+}{E}\ FA\overset{+}{B}\ AFEDCBA\cdots \tag{4-10}$$

这种 I_3 型层错相当于具有三个原子层厚的孪晶,可以看成是在如图4.20(a)所示的 I_1 型层错的基础上,经柏氏矢量为$\frac{1}{3}[1\bar{1}\bar{1}]$和$\frac{1}{6}[\bar{1}11]$的两不全位错在 FE 和 ED 两原子层之间相继滑移的结果。若在{112}面上形成一部分 I_3 型层错时,其边界的一端为三个分布在相邻三个滑移面上的$\frac{1}{6}<111>$不全位错,另一端为柏氏矢量和等于零的区域位错,如图4.20(b)所示。

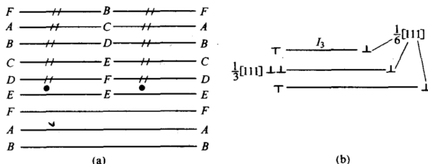


图4.20 在$(1\bar{1}2)$面上形成的(a)部分 I_1 型层错和(b)部分 I_3 型层错

4.5.4 扩展位错

A 在{110}面上的扩展位错

如图4.17所示,B层原子要从一个平衡位置滑移到另一个平衡位置时,比较容易的途径是将全位错的运动分解成三个不全位错的运动,即

$$\underset{\boldsymbol{b}}{\frac{a}{2}[1\ 1\ 1]} \rightarrow \underset{\boldsymbol{b}_1}{\frac{a}{8}[1\ 1\ 0]} + \underset{\boldsymbol{b}_2}{\frac{a}{4}[1\ 1\ 2]} + \underset{\boldsymbol{b}_3}{\frac{a}{8}[1\ 1\ 0]}$$

这种全位错分解的特点是,所形成的三个不全位错位于同一滑移面内。其中,$\boldsymbol{b}_2$ 位错留在原位错 $\boldsymbol{b}$ 所在处,$\boldsymbol{b}_1$ 和 $\boldsymbol{b}_3$ 两个不全位错构成扩展位错的两个边界。

科恩(Cohen)等人曾用这种模型设想一个$\frac{1}{2}[1\ 1\ 1]$螺型位错分解形成可滑移型扩展位错的可能性,如图 4.21(a)所示。这种分解反应称为可滑移分解。后来,克劳帕(Kroupa)等人又设想$\frac{1}{2}[1\ 1\ 1]$螺型位错可沿属于[111]晶带轴的三个{110}面内分解,如图 4.21(b)和(c)所示。其位错反应如下:

$$\underset{\boldsymbol{b}}{\frac{1}{2}[1\ 1\ 1]} \rightarrow \underset{\boldsymbol{b}_1}{\frac{1}{8}[1\ 1\ 0]} + \underset{\boldsymbol{b}_2}{\frac{1}{8}[1\ 0\ 1]} + \underset{\boldsymbol{b}_3}{\frac{1}{8}[0\ 1\ 1]} + \underset{\boldsymbol{b}_4}{\frac{1}{4}[1\ 1\ 1]}$$

$\boldsymbol{b}_4$ 为中心螺型位错,分别与另三个不全位错以三片层错相联,故称为三叶位错。在图 4.21 中,(b)和(c)是等效的两个状态,可以交替地沿同一条位错线扩展。

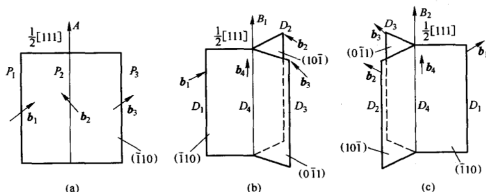


图 4.21　柏氏矢量为$\frac{1}{2}[1\ 1\ 1]$的螺型位错在{110}面上分解

(a)可滑移分解;(b)和(c)不可滑移分解,两种状态相差 180°

B　在{112}面上的扩展位错

弗兰克(Frank)等人提出,$\frac{1}{2}[1\ 1\ 1]$螺型位错可在{112}面上按下式分解扩展:

$$\frac{1}{2}[1\ 1\ 1] \rightarrow \frac{1}{6}[1\ 1\ 1] + \frac{1}{3}[1\ 1\ 1]$$

这是由于一个螺型全位错分解成两个螺型不全位错,均位于同一滑移面上,如图 4.22(a)所示。这种位错组态在外力作用下可整体滑移,也称为可滑移分解。后来,赫许(Hirsch)等人又提出了一种$\frac{1}{2}[1\ 1\ 1]$螺型位错沿属于[111]晶带轴的三个{112}面上分解的可能性,如图 4.22(b)所示,即

$$\frac{1}{2}[1\ 1\ 1] \rightarrow \frac{1}{6}[1\ 1\ 1] + \frac{1}{6}[1\ 1\ 1] + \frac{1}{6}[1\ 1\ 1]$$

其特点是形成相交的三片层错,分别以三个$\frac{1}{6}[1\ 1\ 1]$螺型不全位错为边界,但却无中心不全位错。斯利维克(Sleeswyk)认为这种中心无不全位错的扩展位错不稳定,应按图 4.22(c)所示的方式分解。在无应力作用时,图 4.22(c)中所示的组态可有三种等效情况(相差 120°)。这种各不全位错分别位于不同滑移面上的分解,也称为不可滑移分解。所形成的扩展位错组态具有阻碍其他位错滑移的特性。

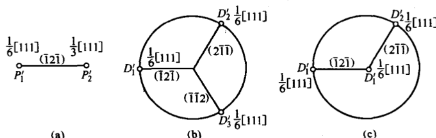


图 4.22 $\frac{1}{2}[1\ 1\ 1]$螺型位错在{112}面上分解机制示意图

(a) 可滑移分解;(b) 不可滑移分解,无中心位错;(c) 不可滑移分解,有中心位错

4.6 密排六方晶体(Hexagonal Close-packed Crystal)中的位错

4.6.1 层错

密排六方晶体也为密排结构,其堆垛次序为 *AB AB AB*,二层一循环。密排面是(0001)面,这种密排面也可以用刚球模型来描述,如图 4.23 所示。在密排六方晶体中,层错也有内禀型和外延型之分,可分别由以下三种方式形成。

A 抽出一层原子后,上下两部分晶体适当平移

若在密排六方晶体的正常 *AB AB* 堆垛次序中去掉某一层原子,如

B 层原子,再使其上各层原子的位置平移$\frac{1}{3}[\bar{1}100]$,会使堆垛次序变为

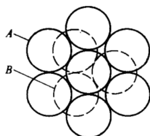


图 4.23　密排六方晶体中密排面的刚球模型

$$\cdots ABABA \vdots \underset{C\ A\ C\ A}{\overset{}{ABAB}}\cdots \tag{4-11}$$

则形成内禀型层错,即

$$\cdots AB\ AB\ AB\ A \vdots CA\ CA\ CA\cdots \tag{4-12}$$

其特点是从 AB AB 两层循环堆垛过渡到 AC AC 堆垛之间,存在三层堆垛结构 BAC。由于不可能由同种类面构成邻近面,如 AA 和 BB,所以在密排六方晶体中的层错必然包含面心立方晶体中的堆垛层次。

B　简单滑移

若将晶体在某一 B 层处剖开,使上部晶体相对下部晶体平移至 C 位置,也可形成内禀型层错,例如

$$\cdots ABAB\ \underset{C\ A\ C\ A\ C\ A}{ABABAB}\cdots \tag{4-13}$$

则得

$$\cdots AB\ AB\ AB \vdots CA\ CA\ CA\cdots \tag{4-14}$$

C　插入一层原子

若在 A 和 B 层之间插入一层 C 原子,则可形成外延型层错,即

$$\cdots ABABA\ C\ BABAB\cdots \tag{4-15}$$

显然,第一种和第三种情况可以相互转化,通过滑移会由一种层错变成另一种层错,例如

$$\begin{array}{ll} \text{第一种:} AB\ AB\ A \vdots & C\ \ A\ \ C\ \ A\ \ C \\ & \downarrow\ \ \downarrow\ \ \downarrow\ \ \downarrow\ \ \downarrow \text{(滑移)} \\ \text{第三种:} AB\ AB\ A & C\ \ B\ \ A\ \ B\ \ A \end{array} \tag{4-16}$$

4.6.2　不全位错

A　密排六方晶体中的矢量记号

若密排六方晶体中的层错终止在晶体内部,必然在边界处形成不全位错,并有肖克莱不全位错和弗兰克不全位错之分,为了比较方便地表示密排六方晶体中的位错及滑移面,常采用两种记号方法。

(1) 柏格森(Berghezan)记号

该记号是利用图 4.24 所示的双角锥体表示密排六方晶体中的各矢量。可以看出,密排六方晶体中重要的位错有:

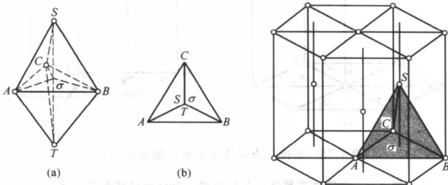


图 4.24 密排六方晶体中的柏格森记号

1) 6 个柏氏矢量等于双角锥体基面 ABC 的边长的全位错,即 $\pm\overrightarrow{AB}$, $\pm\overrightarrow{BC}$和$\pm\overrightarrow{CA}$;

2) 2 个柏氏矢量垂直于基面的全位错,即$\overrightarrow{ST}$和$\overrightarrow{TS}$;

3) 12 个$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}3\rangle$型的不全位错,其柏氏矢量可用$\overrightarrow{SA}/\overrightarrow{TB}$表示,是代表 SA 和 TB 中点连线长度两倍的矢量;

4) 4 个柏氏矢量垂直于底面的不全位错,即$\pm\overrightarrow{\sigma S}$和$\pm\overrightarrow{\sigma T}$;

5) 6 个在基面上的肖克莱不全位错,其柏氏矢量分别为$\pm\overrightarrow{A\sigma}$, $\pm\overrightarrow{B\sigma}$ $\pm\overrightarrow{C\sigma}$;

6) 12 个柏氏矢量为$\pm\overrightarrow{AS}$、$\pm\overrightarrow{BS}$、$\pm\overrightarrow{CS}$、$\pm\overrightarrow{AT}$、$\pm\overrightarrow{BT}$和$\pm\overrightarrow{CT}$的不全位错,是由 4)和 5)两不全位错合成的结果。

密排六方晶体中常见位错的柏格森记号,见表 4.3。

表 4.3 密排六方晶体中常见位错的柏格森记号

记号	$\overrightarrow{AB}$	$\overrightarrow{TS}$	$\overrightarrow{SA}/\overrightarrow{TB}$	$\overrightarrow{A\sigma}$	$\overrightarrow{\sigma S}$	$\overrightarrow{AS}$
b	$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0\rangle$	$[0001]$	$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}3\rangle$	$\frac{1}{3}\langle \bar{1}100\rangle$	$\frac{1}{2}[0001]$	$\frac{1}{6}\langle \bar{2}203\rangle$

(2) 戴曼诺(Damiano)记号

图 4.25 所示的基本六方单位晶胞上,各符号表示密排六方晶体中常见位错的柏氏矢量及滑移面,见表 4.4。

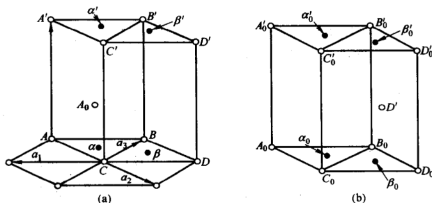


图 4.25 密排六方晶体中矢量的戴曼诺记号

表 4.4 密排六方晶体中常见位错及滑移面的戴曼诺记号

柏氏矢量或滑移面	戴曼诺记号	米勒－布拉维斯指数
全位错的柏氏矢量	$\overrightarrow{AC}$	$\frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}0]$
	$\overrightarrow{AA'}$	$[0001]$
	$\overrightarrow{C'B}$	$\frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}23]$
肖克莱不全位错的柏氏矢量	$\overrightarrow{A\alpha}$	$\frac{1}{3}[\bar{1}100]$
	$\overrightarrow{A\beta}$	$\frac{2}{3}[\bar{1}100]$
弗兰克不全位错的柏氏矢量	$\overrightarrow{\alpha A_0}$	$\frac{1}{2}[0001]$
	$\overrightarrow{A\beta'}$	$\frac{1}{3}[\bar{2}203]$
	$\overrightarrow{BA_0}$	$\frac{1}{6}[20\bar{2}3]$
	$\overrightarrow{C\alpha'}$	$\frac{1}{3}[0\bar{1}13]$
滑移面	(ABC)	(0001)
	$(ABB'A')$	$(0\bar{1}10)$
	$(AB'C')$	$(1\bar{1}01)$
	(CA_0B')	$(11\bar{2}2)$

B 肖克莱不全位错

在铍、镁、镉和锌等具有密排六方点阵的金属中，滑移系统$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0\rangle$

(0001)的临界切应力很低,使基面滑移易于进行。在基面上,全位错可分解成两个肖克莱不全位错,中间以内禀型层错区相连,如图 4.26 所示。相应的位错反应按柏格森记号为:

$$\overrightarrow{AB} \rightarrow \overrightarrow{A\sigma} + \overrightarrow{\sigma B} \tag{4-17}$$

即

$$\frac{1}{3}[1\,1\,\bar{2}\,0] \rightarrow \frac{1}{3}[1\,0\,\bar{1}\,0] + \frac{1}{3}[0\,1\,\bar{1}\,0]$$

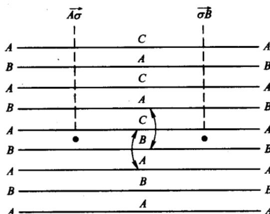


图 4.26 全位错在基面上分解成两个肖克莱位错和内禀型层错

这种位错分解使位错能量减小 1/3。所形成的肖克莱不全位错可在基面上运动,使堆垛次序作如式(4-11)和式(4-13)所表述的变动。两肖克莱不全位错的柏氏矢量同全位错的柏氏矢量之间呈 ±30°角。肖克莱不全位错可具有刃型、螺型或混合型等类型。

C 弗兰克不全位错

在密排六方晶体中,可由空位盘崩塌或间隙原子沉淀形成弗兰克位错。由图 4.27 可见,空位在基面上聚集和崩塌后,会导致同种类原子层成为近邻,使系统能量增高。改变这种不稳定原子组态的一种方式是将空位盘上面的一层原子由 B 位置改变到 C 位置,成为一层附加的 C 原子,如图 4.27(c)所示。这相当于其上层和下层各有符号相反的一个柏氏矢量为$\frac{1}{3}\langle 1\,0\,\bar{1}\,0\rangle$的肖克莱位错运动的结果。所涉及的位错反应按戴曼诺记号为:

$$\overrightarrow{\alpha A_0} + \overrightarrow{\alpha A} + \overrightarrow{A\alpha} \rightarrow \overrightarrow{\alpha A_0} \tag{4-18}$$

即

$$\frac{1}{2}[0\,0\,0\,1]+\frac{1}{3}[1\,\bar{1}\,0\,0]+\frac{1}{3}[\bar{1}\,1\,0\,0]\to\frac{1}{2}[0\,0\,0\,1]$$

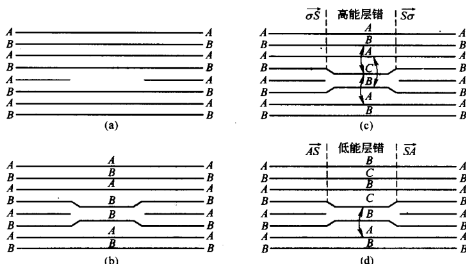


图 4.27　弗兰克位错环的空位盘崩塌形成机制

(a) 空位在基面上聚集形成空位盘;(b) 空位盘崩塌;

(c) 调整层错区堆垛次序,形成外延型弗兰克位错环;

(d)调整层错区堆垛次序,形成内禀型弗兰克位错环

然而,按此种方式所形成的弗兰克位错环包围着外延型层错,所需能量较大,故有可能在层错区萌生一个肖克莱位错环,并由其扩展运动使层错变为内禀型。于是,在原弗兰克位错环所在的边界处,便可能发生如下反应而形成$\overrightarrow{AA_0}$型的弗兰克位错。



$$\overrightarrow{A\alpha}+\overrightarrow{\alpha A_0}\to\overrightarrow{AA_0} \tag{4-19}$$

即

$$\frac{1}{3}[\bar{1}\,1\,0\,0]+\frac{1}{2}[0\,0\,0\,1]\to\frac{1}{6}[\bar{2}\,2\,0\,3]$$

在所得到的弗兰克位错环内包围着内禀型层错,层错能较低。一般认为,外延型层错的层错能约为内禀型层错的三倍。所以,在密排六方晶体中由空位盘崩塌形成的弗兰克位错环的柏氏矢量以$\frac{1}{6}\langle 20\,\bar{2}3\rangle$为主。位错环的尺寸受层错能、应力、温度和杂质含量等影响。$\overrightarrow{\alpha A_0}$和$\overrightarrow{AA_0}$型弗

兰克位错环不能沿基面滑移(不动位错),但两者均可攀移。

另外,也可以由间隙原子在基面上沉淀(Precipitate)形成如图 4.28(a)和(b)的围绕外延型层错的弗兰克位错环,其柏氏矢量为$\frac{1}{2}[0\ 0\ 0\ 1]$。由于其层错能高使位错环尺寸足够大时,会按式(4-19)通过肖克莱位错环的萌生与运动而转变成内禀型弗兰克位错环,如图 4.28(c)所示。在经辐照的 Mg、Cd 和 Zn 中,已观察到间隙原子在基面上沉淀形成的弗兰克位错环,其柏氏矢量为$\frac{1}{2}[0\ 0\ 0\ 1]$和$\frac{1}{6}[2\ 0\ \bar{2}\ 3]$两种。

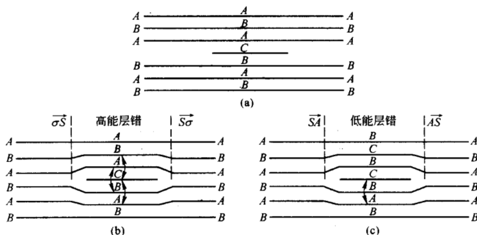


图 4.28 弗兰克位错环的间隙原子沉淀形成机制

(a)间隙原子在基面上沉淀;(b)外延型弗兰克位错环的形成;(c)内禀型弗兰克位错环的形成

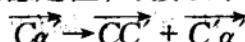
D 其他不全位错

除在表 4.3 中已讨论过的几种不全位错外,其余位错均与位错分解或合成有关。例如,可动的不全位错$\overrightarrow{A\beta}$位于基面,围绕着内禀型层错,并对以下位错分解反应具有亚稳定性。



$$\overrightarrow{A\beta} \rightarrow \overrightarrow{AC} + \overrightarrow{C\beta} \quad 或 \quad \overrightarrow{A\beta} \rightarrow \overrightarrow{AB} + \overrightarrow{B\beta}$$

不动位错$\overrightarrow{C\alpha}$也有一定的亚稳定性,可按以下反应分解:

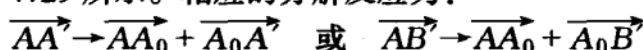


$$\overrightarrow{C\alpha} \rightarrow \overrightarrow{CC'} + \overrightarrow{C'\alpha}$$

其中,分解产物$\overrightarrow{CC'}$和$\overrightarrow{C'\alpha}$两位错可分别在($ACC'A'$)和$A'B'C'$面上滑移。

全位错$\overrightarrow{AA'}$或$\overrightarrow{AB'}$为可动位错,但在一定条件下可分解形成不动位

错组态，如图 4.29 所示。相应的分解反应为：



$$\overrightarrow{AA'} \rightarrow \overrightarrow{AA_0} + \overrightarrow{A_0A'} \quad 或 \quad \overrightarrow{AB'} \rightarrow \overrightarrow{AA_0} + \overrightarrow{A_0B'}$$

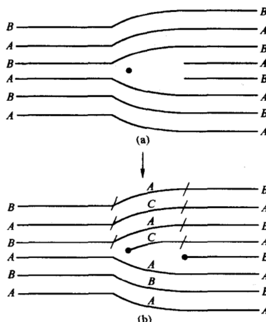


图 4.29　全位错$\overrightarrow{AA'}$分解

(a) $\overrightarrow{AA'}$全位错组态；(b) $\overrightarrow{AA_0}+\overrightarrow{A_0A'}$复合位错组态

由图 4.29 可知，这种分解反应需要攀移条件，可通过空位或间隙原子短程扩散发生。这种分解反应对于限制非基面滑移有重要作用，可能是使全位错$\overrightarrow{AA'}$或$\overrightarrow{AB'}$滑移时有很高静态 P-N 障碍的原因。

4.6.3　位错的扩展

在密排六方晶体中有四种滑移系统(Slip System)，即基滑移系统 $\langle 11\bar{2}0\rangle\{0001\}$、棱柱滑移系统 $\langle 11\bar{2}0\rangle\{10\bar{1}0\}$、I 型棱锥滑移系统 $\langle 11\bar{2}0\rangle\{10\bar{1}1\}$ 和 Ⅱ 型棱锥滑移系统 $\langle 11\bar{2}3\rangle\{11\bar{2}2\}$。其中以基面滑移系统最常见，其他三种只在合适的条件下才能出现。而且全位错扩展主要在基面上进行，如式(4-17)所示。扩展位错的宽度与层错能成反比，层错能较高的 Mg 中位错一般不扩展，而层错能较低的 Cd 和 Zn 中位错有较明显的扩展。

在有利于棱柱滑移的密排六方结构金属中，基面滑移虽可进行，但全

位错不易发生式(4-17)所示的分解扩展。这可能因为在密排六方结构金属中,晶面间距与 c/a 值有关。在 $c/a<1.633$ 的情况下,基面间距变小,使相邻原子层间的键合增强,从而难以改变堆垛次序而形成稳定层错。

在受高应力作用下及晶体取向不利于基面滑移和棱柱滑移的条件下,在$\{10\bar{1}1\}$和$\{11\bar{2}2\}$面上以$\frac{1}{3}<11\bar{2}3>$为柏氏矢量的滑移系统可以开动。其中,$\{11\bar{2}2\}$面也是密排六方结构金属中常见的孪晶面之一。但由于相应的柏氏矢量较大,而且此类原子面不是理想的密排面,使位错滑移的晶格阻力较大。罗森鲍姆(Rosenbaum)等人在刚球点阵模型的基础上提出,柏氏矢量为$\frac{1}{3}[1\ 1\ \overline{23}]$或$\overrightarrow{B'C}$的全位错在$(11\bar{2}2)$面上可能分解成四个不全位错,其柏氏矢量均为$\frac{1}{4}\overrightarrow{B'C}$。其中,一个不全位错的中心同时占据三个相邻的$(11\bar{2}2)$面,而在各面上引起的原子位移不同,称为区域位错。另外三个不全位错分别位于三个$(11\bar{2}2)$面上,与区域位错和三片相邻的层错共同组成扩展位错,如图 4.30 所示。由于区域位错运动时可形成孪晶,使$<11\bar{2}3>\{11\bar{2}2\}$滑移同孪晶有密切关系。

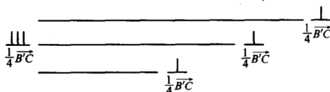


图 4.30 全位错$\overrightarrow{B'C}$在$(11\bar{2}2)$面上分解形成一个区域位错和三个不全位错

5 位错的来源及实验基础

尽管位错是热力学不稳定的缺陷，但它们却经常存在于晶体之中，特别是金属晶体，位错密度很高。位错由何而来？如何观察？将在本章讨论。

5.1 位错概念的产生

晶体的塑性变形是提高金属材料的性能和制造金属制品的重要手段。当一块单晶体发生塑性变形时，在它的表面出现一些线状痕迹，经放大观察，发现它们是晶体相邻部分彼此相对滑动在表面上造成的小台阶，这些痕迹被称为滑移线。进一步分析和测量表明，晶体滑移总是沿着一定的密排晶面和密排方向进行的，而且，只有当沿着某一滑移系统（即一个滑移面和其上的一个滑移方向）的切应力达到一定的临界值时，滑移才开始进行，这个必要的应力被称为临界分切应力。

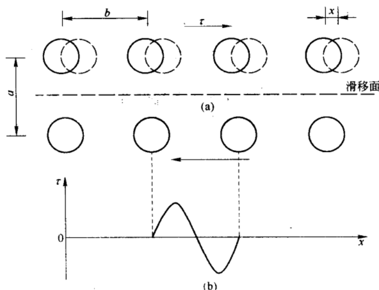


图 5.1　计算理论切变强度的模型

如何从原子角度来理解滑移过程呢？最简单的设想是以理想完整晶体模型为出发点，假定滑移时滑移面两侧的晶体像刚体一样，所有原子同步平移，即刚体滑移。按照刚体滑移模型计算了使晶体开始滑移所必需的应力，如图 5.1 所示。图中 τ 是施加于晶体的与变形相平衡的切应力，其大小随滑移面两侧晶体相对位移量变化，而最终取决于滑移面两侧原子间的相互作用。由于晶格的周期性(Periodicity)，它是切位移 x 的周期函数。当 $x=0$，即变形尚未开始时，$\tau=0$；当 $x=b$，即两晶面相对移动一个原子间距，原子的排列又恢复到变形前的起始状态时，$\tau=0$；而且当 $x=b/2$ 时，τ 也等于 0，这是因为此时原子处于对称位置，每个原子所受的来自其他原子的使它向左和向右的作用力互相抵消。所以，作为近似处理，可以假定切应力 τ 是位移 x 的正弦函数，如图 5.1(b)所示。

$$\tau=\tau_m\sin\left(\frac{2\pi x}{b}\right) \tag{5-1}$$

式中 τ_m——正弦曲线的振幅；

b——周期。

在位移 x 很小时，上式简化为

$$\tau=\tau_m\frac{2\pi x}{b} \tag{5-2}$$

同时，晶体在变形很小时满足胡克定律，即

$$\tau=\mu\gamma=\mu\frac{x}{a} \tag{5-3}$$

式中 μ——切变模量；

γ——切应变。

从式(5-2)和式(5-3)可得最大切应力为：

$$\tau_m=\frac{\mu}{2\pi}\frac{b}{a} \tag{5-4}$$

若 $a=b$，则

$$\tau_m=\frac{\mu}{2\pi} \tag{5-5}$$

最大切应力 τ_m 即为理论切变强度，亦即理论临界分切应力，因为当外加应力达到 τ_m 之后，理想完整晶体就开始发生滑移变形。

与晶体的实际强度相比，$\frac{\mu}{2\pi}$显得太大了。它们之间的巨大差异最终要求从根本上否定刚性相对滑移的假设，即必须承认滑移首先从晶体中

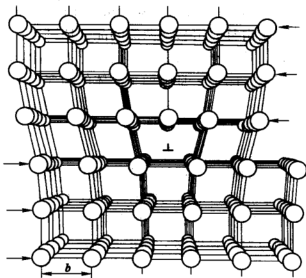


图 5.2　位错的原子组态

的局部薄弱地区开始，然后逐渐扩大到整个晶面。这种逐步滑移的观念揭示了已滑移区和未滑移区边界的一种特殊原子排列形式，见图 5.2 所示。它具有在微小应力作用下运动并导致塑性变形的性质。1934 年第一次有人提出，在未变形的晶体中本来就包含有这种形式的晶格缺陷，称为位错。

5.2　位错的来源

根据理论上的计算，由于位错的能量很大，除非晶体受到的应力接近理论切变强度，位错是不能靠热激活产生的。因此，位错不会在晶体中均匀形核(Homogeneous Nucleation)，它只能在一些具备了条件的特殊地方产生。

过饱和空位可以凝聚成空位片，空位片崩塌时便转化成位错环(见图 5.3)，这是产生位错的一种重要途径。从熔体中生长出来的晶体，在高温时空位浓度可达 10^{18}个/cm^3 以上，而室温的平衡空位浓度很小，如果空位全部聚成半径为 10^{-5} cm 的圆片，它们崩塌后将形成每立方厘米 10^{12} 个位错环，相当于位错密度 6×10^7 cm/cm^3。实际上不会全部空位都转变成位错环，因为表面、晶粒间界和已有的位错也起着吸收空位作用，它们的一部分不免要流入这些地方而消亡。

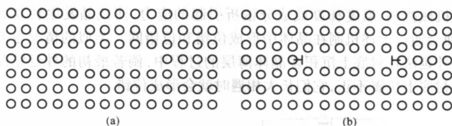


图 5.3 空位片转化成位错环

结晶时若杂质分凝或成分偏析(Component Segregation)显著,最后凝固的晶体成分不同于先前凝固的晶体,从而点阵常数也要有所不同。作为点阵常数逐渐变化的结果,在过渡区可能形成一系列刃型位错。同样,从表面向晶体中扩散另一种元素时,也会因为与原子大小不同相关的内应力形成位错。如图 5.4 是磷向硅片中扩散时因原子尺寸差异效应而产生的位错网。

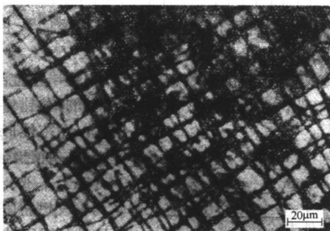


图 5.4 因磷扩散到硅片中而引起的位错网

晶体中的沉淀物或夹杂物若在周围基体中产生较大的应力(例如相变应力或因膨胀系数(Expansion Coefficient)不同在温度变化时产生的热应力),也会导致位错的产生。结晶过程中正在生长的两部分晶体相遇,如果它们的位向有轻微差别,在结合处将形成位错。图 5.5 示意地表示相对有一倾转角的两块晶体,在生长到相互接触时,在它们中间形成一列刃型位错。以这种方式产生位错的典型例子是熔体中的树枝状结晶,如

果因机械扰动、温度梯度或成分偏析引起的应力，使枝晶发生转动或弯曲，便会通过上述机制在晶体中形成位错和位错网。类似的情况也发生于以外延法在衬底上沉积多晶体薄层的过程中，倘若最初的外延结晶核心在衬底上位置不正，它们长大相遇时就会形成位错。

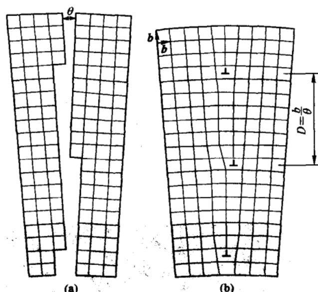


图 5.5 相对倾转两晶体相遇时形成的位错

当晶体受到力的作用，局部地区会产生应力集中，如在裂缝尖端、夹杂物界面、表面损伤附近等，倘若应力集中程度达到理论切变强度水平，便有可能在这里直接产生位错。

假设在某面心立方的基体上有一半径为 R 的球状夹杂物，并设[110]为基体对外力的有利取向(Orientation)，则夹杂物在[110]方向上引起的最大分切应力，应在以此方向为轴向，以$\sqrt{2}R$ 为半径的圆柱面与此球同心相贯时的交线处，如图 5.6(a)所示。当此应力达到一定值时，在此交线的某处便会首先产生一小段位错，如图 5.6(b)上的 BAC，显然这段位错的柏氏矢量为$\frac{a}{2}$[110]。根据柏氏矢量与位错线的取向关系可以判断，A 处为刃型位错，它在应力作用下沿[110]方向滑移；B、C 两处分别为右、左螺型位错，在应力作用下，会在位错的法向，即沿着球与柱面的交线向前滑移；A-B、A-C 之间的位错线也同时向着法线方向滑移，如图 5.6(c)所示。各段位错线上的箭头，标示着它的滑移方向，虚、实影

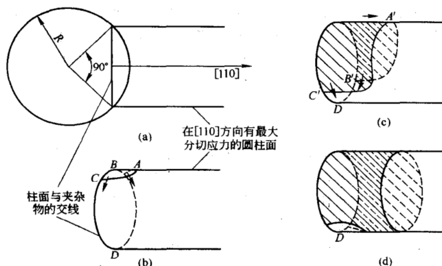


图 5.6 夹杂物周围位错环的形成

线，分别画出 CA、BA 各段位错滑移时在柱面上扫过的滑移区。当 CA、BA 的两端移过此柱面一周，在 D 点相遇时，左、右螺型位错互相抵消而消失。A 点两边的混合位错线，向前滑移时所形成的异号螺型分量随相遇随抵消，使相遇后连成的位错环的长度缩短。直到它成为与[110]方向垂直的刃型位错环时，长度变得最小，形状才稳定下来。在应力作用下，位错环继续向前滑移，如图 5.6(d)所示。放出一个位错环，会使柱、球交线处的应力得到一定程度的松弛而略微降低。当这个交线上的应力仍可产生位错时，在交线的某处(如 D 处)，又可产生一小段位错，发生同样一个过程，产生同样一个位错环，使交线处的应力再得到一次松弛。当交线处的应力被松弛、降低到一定程度，不足以产生位错时，或者已经放出的位错环在前方遇到障碍而发生塞积，其阻力超过了交线处的应力时，这里才停止放出位错环。由于位错环遇到障碍便会塞积，所以这样的夹杂物附近，往往可观察到一系列的位错环。

5.3 位错的实验基础

位错是一种具有特殊结构的晶格缺陷，因为它在一个方向上尺寸较大，所以被称为线状缺陷，它对晶体的生长、相变(Phase Transformation)、扩散、塑性变形、断裂(Fracture)以及其他许多物理、化学性质都具有重要影响，而且对它的认识是建立在深厚的科学实验基础之上的。

从20世纪50年代开始实验观测位错以来，目前已有多种实验技术用于位错的观察，包括光学、电子和场离子显微镜以及X射线技术等广泛用于分析研究位错的密度、分布和组态以及它们的运动和交互作用等。位错实验观测技术主要有以下几种。

5.3.1　浸蚀法(Etching Method)

一块包含位错的晶体，在被适当的浸蚀条件作用时，其表面受蚀的程度，有位错露头的地方和没有位错露头的地方是不一样的，由于位错周围原子排列偏离正常规律，有点阵畸变，与基体比较，这里的能量较高，而且可能还会吸附杂质原子，因此采用适当的化学浸蚀、电解浸蚀或热浸蚀的方法，可以使晶体表面的位错露头处优先溶解或蒸发，形成蚀坑。图5.7示意地说明位错与晶体表面相遇处形成蚀坑的几种情况。图5.8是Li晶体中的位错腐蚀坑。

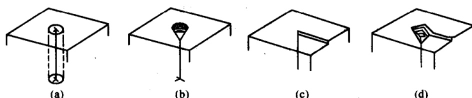


图5.7　位错在晶体表面露头处形成蚀坑
(a)刃型位错，圆柱状区域的物理和化学性质与别处不同；(b)由于刃型位错周围较多地受到浸蚀而形成锥状坑；(c)螺型位错露头处；(d)由于浸蚀沿着螺旋方向优先进行而形成螺旋形蚀坑

采用这种方法时，并非得到的所有蚀坑都是位错的反映，为了说明它是位错，还必须证明蚀坑和位错的一一对应关系。蚀坑的形状和结构对晶体表面的位向是敏感的，也与位错的特征有关，因此可区别刃型位错和螺型位错，也可用于研究位错的运动。图5.9是氟化锂晶体表面的位错浸蚀坑，是使用两次浸蚀法得到的。当第一次浸蚀时，位错的蚀坑呈现尖底状；当有应力作用在晶体上时，位错发生运动，运动的距离取决于应力的大小和作用时间的长短。把受过力的晶体再浸蚀一次，位错在新位置上的蚀坑仍为尖底形，而位错的原来位置上的蚀坑则一方面扩大，一方面改变成为平地状。

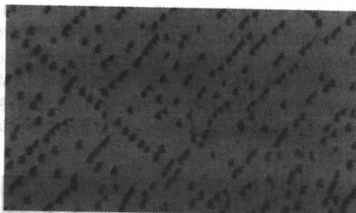
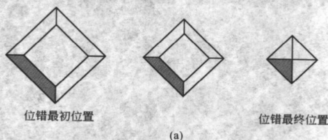
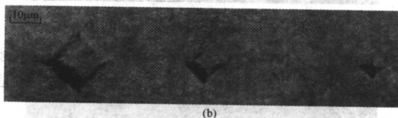


图 5.8 Li 晶体中的位错腐蚀坑



(a)



(b)

图 5.9 位错运动后的蚀坑

(a) 示意图;(b) 氟化锂晶体表面的位错浸蚀坑,
左边是运动前的原位置,右边是运动后的新位置

由于蚀坑占据一定的面积,当位错密度较大时,蚀坑会彼此重叠很难区分,所以这种方法只能用于位错密度小于 $10^6\ cm^{-2}$的晶体,并且只能观察表面附近的位错,应用受到限制。

5.3.2 缀饰法(Decorating Method)

利用杂质原子与位错之间存在相互作用,杂质原子沿位错线扩散快

和在位错线上容易产生沉淀这些性质,经过适当热处理(Heat Treatment)可以使杂质沿位错线析出。通过析出物质点的"缀饰"使位错成为"可见"的方法称为缀饰法。杂质原子可以是通过光学作用而从晶体中的化学元素转化来的,也可以是外加的,例如可以通过将溴化银晶体适当曝光,正常点阵处不发生光解,位错线上的溴化银则发生光解,使银的颗粒聚集在位错附近而得到缀饰,见图 5.10;也可以在氯化钠晶体中外加金属钠来缀饰位错。

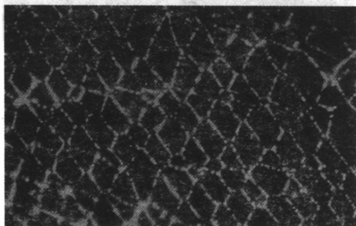


图 5.10　溴化银晶体上的位错被银缀饰

缀饰法大都应用于透明晶体,在金属中这种方法应用得不多。用红外线观察时只能用于对红外线吸收不大的晶体,如硅。图 5.11 是以硝酸

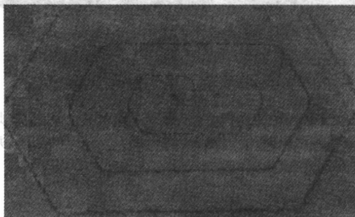


图 5.11　硅晶体中的位错源

铜为扩散剂,通过铜质点沿位错线的沉积,然后用红外线看到的硅中的一种位错增殖机构。其方法是:在900℃温度下,把Cu扩散进Si晶体,再将晶体冷却到室温,Cu沉淀在位错线及其附近,Si晶体可以透射红外线,而Cu粒子不能透射红外线,用红外线照射时,被Cu缀饰的位错线就呈现为暗影。缀饰法为了解位错在晶体内部的空间组态提供了可能性,但它只能显示经过热处理的、被沉淀质点钉扎(Pinning)的不能动的位错组态。

5.3.3 透射电子显微(TEM)分析

利用透射电镜可在很高的放大倍数下,观察、研究薄膜试样中的位错。目前,高分辨率电子显微镜的分辨率已小于0.2 nm。使用透射电镜研究位错的方法有直接观察法、水纹图像法和衍射衬度法。

A 直接观察法(Direct Observation Method)

1956年门特(Menter)应用透射电镜观察到面间距约为1.2 nm晶面上的位错。以后随电镜分辨率的提高,观察到锗晶体(111)晶面的位错,(111)面间距为0.327 nm,见图5.12所示。图5.13是用透射电子显微镜观察到的铸铁薄膜中蠕虫状石墨(Graphite)中的位错。

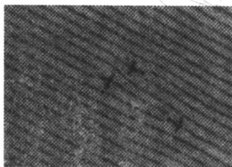


图5.12 锗晶体中位错的直接观察



图5.13 透射电镜下观察到的铸铁薄膜中的位错

B 水纹图像法(Moire Pattern Method)

为了能在分辨率不足的情况下看到晶体中的位错,可设法把晶体原子面间的间距放大,起到提高分辨率的作用。如两组面间距分别为 d_1 和 d_2 的平行线,如以一定的角度叠加,可得到比原来平行线的周期大得多的平行黑点,且有同样的晶体结构,但点阵常数不同。两个金属薄膜叠

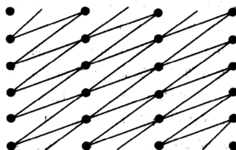
加也产生同样的结果，这种叠加后的图像称为水纹图。如图 5.14 所示，设有两组平行线Ⅰ与Ⅱ，各与纵轴相交成角 φ_1 与 φ_2，Ⅰ组平行线的间距为 d_1，Ⅱ组平行线的间距为 d_2。这两组平行线重叠后所得到的图形如图 5.14(a)中的黑点所示。利用几何学中的关系如图 5.14(b)所示，可以证明

$$\frac{PB}{RB}=\frac{QB}{QR}$$

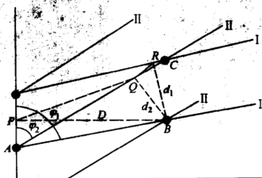
而 $$QR=\sqrt{d_1^2+d_2^2-2d_1d_2\cos(\varphi_1-\varphi_2)}$$

因为水纹图中的平行线间距 $D=PB$，即

$$D=\frac{d_1d_2}{\sqrt{d_1^2+d_2^2-2d_1d_2\cos(\varphi_1-\varphi_2)}}$$



(a)



(b)

图 5.14 水纹图放大原理

(a)两组平行线重叠所得的水纹图；(b)几何分析

考虑两种特殊情况：

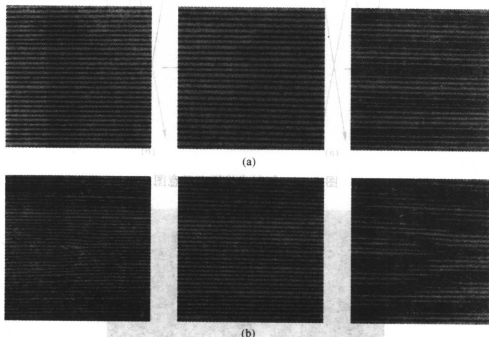
(1) 平行重叠：Ⅰ与Ⅱ平行，而 $d_1 \neq d_2$，则

$$D=\frac{d_1 d_2}{d_1-d_2}$$

(2) 旋转重叠：Ⅰ与Ⅱ之间有一个小角 $\varepsilon=\varphi_1-\varphi_2$，而 $d_1=d_2=d$，利用三角函数近似关系可得

$$D=\frac{d}{\varepsilon}$$

在(1)的情况下，放大率约为$\frac{d_2}{d_1-d_2}$，所得水纹图与原来的结构平行。在(2)的情况下，结构放大率约为$\frac{1}{\varepsilon}$，所得到的水纹图的方向与原来的结构方向成 90°。若两组平行线中的一组包含着位错，则两组叠加后的结构中也有位错的形式。图 5.15 是平行重叠的两组线的水纹图，(a)是没有位错的，(b)是有位错的。由于水纹图像法制备试样不容易，使其应用大受限制。



(a)

(b)

图 5.15 平行重叠的水纹图

C 衍射衬度法(Diffraction Contrast Method)

电子束射入晶体内部产生布拉格衍射，如果晶体中没有缺陷，则电子

束透过后的像是均匀的，如果晶体中有缺陷(如位错)存在，则由于位错附近有局部畸变区域，电子束在这些区域的衍射强度和其他部分不同，再利用光阑的作用，就可以显示出位错的形象，这就是衍射衬度成像。图5.16是衍射成像示意图，(a)为明场像，(b)为暗场像。这时物镜光阑限制了衍射电子束通过，故成像的亮度决定于透射电子束的强度，位错由于衍射较多，故透射部分较少，从而其像较暗，成为黑色线条。图5.17为薄膜试样透射像中出现的两组位错，每根位错产生一条黑线，其宽度约为10 nm，比实际位错宽度宽。当位错密度高达$10^{11}\ \mathrm{cm}^{-2}$时，位错形象也能分开。

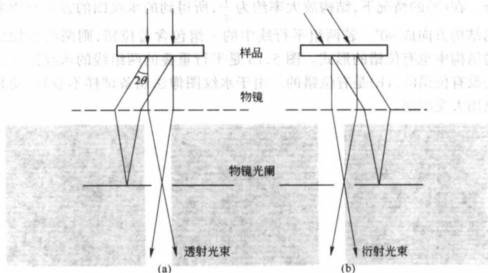
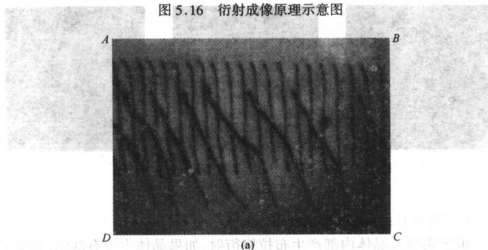


图 5.16　衍射成像原理示意图



(a)

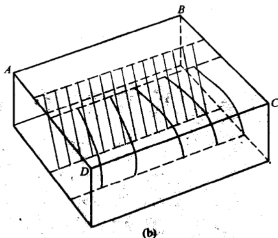


图 5.17 两组平行位错的薄膜透射像

由于衍射法只限于观察薄膜，所以研究试样的体积也很小，而且在加工和制备试样时又可能改变位错的形貌，所以这种研究结果仍不应轻率地推论到大块样品上去。

5.3.4 X 射线衍射分析（X-Ray Diffraction Analysis）

利用 X 射线直接观察位错的方法，在原理上与电子衍射法类似，位错被显示出来是因为位错附近晶面弯曲，使得一次消光效应局部减弱，从而产生给出位错图像的衬度。图 5.18 表示一种常用的衍射方法，试样为片状单晶体，其中的一组晶面处在布拉格反射位置，透射线被屏蔽掉，记录衍射线的底片随样品同步平移，从而可以扫描观察很大的试样面积。

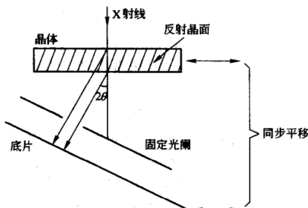


图 5.18 X 射线形貌照像原理示意图

由于X射线的穿透能力强，可用于较厚的试样，但分辨能力较低，位错像宽度约10 μm，适合于观察位错密度较低的晶体（$\leqslant 10^4\ \mathrm{mm}^{-2}$）。图5.19是硅晶体中位错的X射线衍射图像。

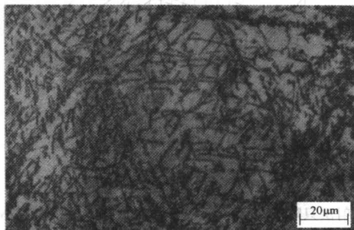


图5.19　硅单晶中的位错

5.3.5　场离子显微分析（Field-Ion Microanalysis）

场离子显微镜的分辨率可以达到0.2～0.3 nm，其原理如图5.20所示。试样是一根很细的金属丝，其端部电解成半径约100～300个原子间距的半球形，置于含有微量氦或氖气的容器中。相对阴极，试样承受高达15 kV的正电压，以致具有尖端表面层的正离子因为自由电子气被吸往晶体内部而部分地裸露出来。当容器中的氦或氖原子接近试样尖端裸露的离子时，在强电场作用下，它们被电离然后射向荧光屏，并在那里显示出试样表面上原子排列的图像。图5.21是钨中的晶粒边界的图像。场离子发射显微镜具有能够直接观察原子的极高的分辨能力，不但

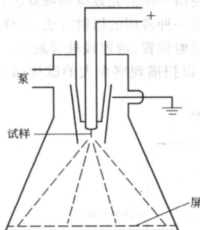


图5.20　场离子发射显微镜原理示意图

能用来观察位错，还能直接观察晶粒间界和点缺陷，它的局限性是仅适用于处在特殊状态下的尺寸细小的高熔点金属试样。

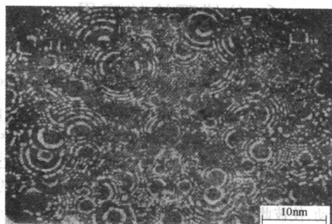
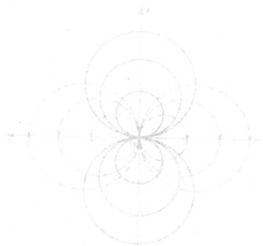


图 5.21 钨试样上晶界的场离子显微像



6 位错理论的应用

6.1 固溶强化效应(Solid Sloution Strengthening Effect)

溶质原子是晶体中的一种点缺陷。由于溶质原子与溶剂原子的体积不同,晶体中的溶质原子会使其周围晶体发生弹性畸变,而产生应力场,此应力场与位错应力场能产生相互作用。如果溶质原子扩散到位错所在处,或位错运动到溶质原子处,系统的总应变能有可能降低的话,缺陷之间就会产生运动,使彼此处于能量相对较低的位置。使位错与溶质原子从低能位置分离需要作功,也就是要增加使位错运动所需的力,因而也就强化了晶体。这种情况属于位错与溶质原子的弹性交互作用,此外还有化学交互作用、电学交互作用和几何交互作用。

6.1.1 弹性交互作用(Elastic Interaction)

第 2 章式(2-40)给出位错与溶质原子的交互作用能公式,由此式可以画出一个围绕刃型位错的等交互作用能线图,见图 6.1 所示。当一个

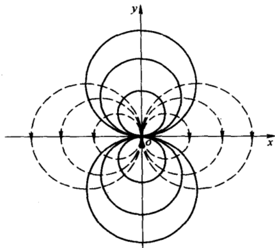


图 6.1 刃型位错周围的交互作用能等位线(实线)与溶质原子迁移线(虚线)

尺寸大的溶质原子从压缩区域向膨胀区域扩散时,它将会沿着图中的虚线方向运动。随着到达低能位置的原子增加,位错线与溶质原子的交互作用达到平衡状态。

位错与溶质原子交互作用的结果,致使大量的溶质原子,尤其是间隙原子,聚集在位错附近区域,形成原子云,称为柯氏气团。形成柯氏气团只要求很少量的溶质原子。在深度冷加工的金属中,位错最大密度为$10^{12}/cm^2$,若沿位错线每一原子间距有一溶质原子的话,需要溶质原子数量也还不过0.1%原子。对退火金属,即使是99.999%纯的金属,其所含杂质也足够形成溶质原子气团。柯氏气团对合金的力学性能产生明显的影响,会引起强化效应。因为有气团靠近的位错受外加应力作用时,位错的滑移会扰乱气团中溶质原子的平衡分布,使整个系统的应变能升高,所以位错的运动受到气团的牵扯,或者说位错被气团所钉扎。当外力不很大,而且气团中的溶质原子能够与位错一起运动时,强化表现为位错拖着气团移动所产生的困难。当外力很大时,位错可能挣脱气团的束缚。位错与溶质原子气团间的交互作用,能很好地解释在一些含有某种杂质的金属中所观察到的明显屈服点现象。这种现象在体心立方金属中最为显著,但在面心立方结构和密排六方结构中也能见到,只是程度较弱而已。图6.2所示的是含氮的β黄铜单晶体中屈服的例子。主要特点是:1)在第一次加载时,应力由上屈服点下降到下屈服点;2)当试样处于过度应变状态而重新加载时,没有屈服点现象;3)当试样发生过度应变以后再经过时效,屈服点现象又重新出现。屈服点在应变时效以后的重新出现,是由

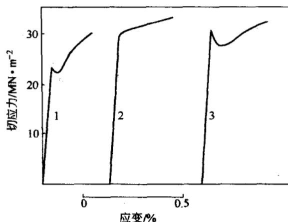


图6.2 含氮的β黄铜单晶体中屈服

于溶质原子又回到在过度应变的金属中已经获得了自由的位错附近，即溶质原子又通过扩散在位错上形成了气团。

温度对柯氏气团的稳定性起很大作用，温度提高，稳定性降低，高于一定温度，柯氏气团便失去作用。所以柯氏气团只对合金在较低温度下的强度起很大作用，对高温强度影响很小。

6.1.2 化学交互作用(Chemical Interaction)

在面心立方金属中，{111}面上的滑移位错分解为两个不全位错而形成扩展位错，两个不全位错之间隔着一层层错，其晶体结构改变为密排六方结构，它具有两层原子的厚度及约 10 个原子间距的宽度，并依靠层错表面能来对抗不全位错之间的斥力以保持平衡。由于溶质原子对不同的晶体具有不同的化学势，所以溶质原子在密排六方的层错中和在面心立方的基体中溶解的浓度是不相同的。溶质原子的这种不均匀分布也能阻止位错的运动而引起强化。此外，由于堆垛层错能随着合金的成分而变化，可想而知原子再分布后层错区域的宽度也会改变。这种溶质原子围绕着位错的非均匀性分布即是溶质原子与位错的一种化学交互作用。溶质原子与位错间的化学交互作用是由铃木秀次于 1952 年到 1955 年间提出来的，故称铃木气团。

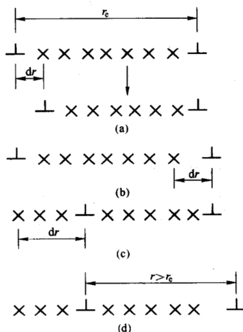


图 6.3 具有铃木气团的扩展位错运动的可能组态(×代表溶质原子)

铃木气团对位错运动也有阻碍作用，如图 6.3 所示。

A 如图 6.3(a)所示的情况

若在外力作用下使层错宽度减小dr时，需有一部分溶质原子由层错区进入基体。但由于从层错区移开的溶质原子数目等于进入基体的原

子数目,因此对整体系统而言不会引起势能改变,即

$$\sum_i \mu_i \mathrm{d}n_i = 0$$

式中 μ_i——溶质原子的化学势;

n_i——具有化学势为 μ_i 的原子数目。

层错宽度将减小对系统能量的变化主要表现为克服两个不全位错间的斥力做功。在数值上等于层错表面能量的减少值,故

$$F_r \cdot \mathrm{d}r = \gamma_1 \cdot \mathrm{d}r$$

式中 F_r——单位长度上两不全位错间的斥力;

γ_1——层错能。

所以

$$F_r = \gamma_1$$

这说明,层错中单位长度的两个不全位错间的斥力在数值上等于层错能。

B 如图 6.3(b)所示的情况

若在切应力作用下使领先的不全位错向前运动 dr 时,系统能量的变化应为

$$\mathrm{d}G = -F_r\mathrm{d}r + \gamma_2\mathrm{d}r - \sigma b\mathrm{d}r = (-\gamma_1 + \gamma_2 - \sigma b)\mathrm{d}r$$

式中 γ_2——在无溶质原子偏聚区的层错能;

b——不全位错的柏氏矢量。

故欲使这种位错组态稳定,应有

$$\sigma b = \gamma_2 - \gamma_1$$

若后续的不全位错受到钉扎,而外加应力继续增大时,会使领先位错继续向前运动,直到不再受后续位错的影响。为使领先位错独立运动,以将两个不全位错分开,所需的外加切应力为

$$\sigma b = \gamma_2$$

C 如图 6.3(c)所示的情况

若在切应力作用下使后续位错向前运动时,在其后面要留下一段溶质原子的富集区。在富集区内层错已经消失,相应的表面能为 γ_{ch}。系统的能量变化为

$$\mathrm{d}G = F_r\mathrm{d}r - \gamma_1\mathrm{d}r + \gamma_{ch}\mathrm{d}r - \sigma b\mathrm{d}r = (\gamma_{ch} - \sigma b)\mathrm{d}r$$

故在领先位错受到钉扎的条件下,为使后续位错向前运动所需外加

切应力符合以下条件：

$$\sigma b = \gamma_{ch}$$

若 γ_{ch}大于 $\gamma_2 - \gamma_1$ 时，会使后续位错在领先位错前进的过程中仍然受到钉扎，则 F_r 减小并最终使后续位错运动所需切应力达到临界值，并可表示为

$$\sigma b = \gamma_{ch} - \gamma_1$$

由上述分析可知，要使扩展位错的领先位错和后续位错运动时，所需施加切应力的大小均与溶质原子在层错区的富集有关。溶质原子的富集要引起层错能变化，故使 $\gamma_2 - \gamma_1 \neq 0$ 及 $\gamma_{ch} \neq 0$。这便是铃木气团能够阻碍扩展位错运动的原因所在。

D 如图 6.3(d)所示的情况

若在外力作用下使扩展位错的两个不全位错同时向前运动时，应满足下列条件：

$$\sigma b = \gamma_2 - \gamma_1 + \gamma_{ch}$$

式中 b——全位错的柏氏矢量。

显然，若扩展位错能整体逃逸气团时，便可快速前进，产生物理屈服(Yield)。然而，若 $\gamma_1 - \gamma_{ch}$ 为负值时，也可能使领先位错逃逸气团的束缚，导致层错区不断扩大。

可见铃木气团对位错起阻碍作用也会引起强化，铃木气团强化合金的原因有：1)扩展位错运动时，由于层错区内的溶质原子的含量与周围基体不同，所以当扩展位错运动时，必然要伴随着溶质原子在基体内分布的变化，此时扩展位错很难运动。2)如果扩展位错与其他位错相交截时，必须先合并成全位错后才能形成割阶，这个过程也需要较大应力。

但是铃木气团对合金的强化作用比柯氏气团要小得多，这是由于扩展位错有一个宽为约 10 个原子间距的堆垛层错区，故很难靠热激活能的作用使扩展位错摆脱溶质原子的束缚。由于温度对铃木气团的影响很小，故在高温时铃木气团仍具有稳定性，所以对金属的高温强度起很大的作用。例如，Ni 基高温合金中加入 Co，可提高高温强度（即扩大了层错区）。这种化学交互作用与位错的取向无关，对于刃型位错和螺型位错，这种交互作用的强弱程度是一样的。

6.1.3 电学交互作用(Electrical Interaction)

假如溶解于铜中的两种溶质原子具有同样的点阵错配度，而它们的

原子价不同,它们仍然可以使固溶体程度不同地发生硬化。这种情况表明,由于围绕溶质原子的电荷相对于围绕溶剂原子的电荷具有一个增量,这个增量是与原子价有关的,所以溶质原子与位错间有电学交互作用发生。电阻测定表明,高价原子溶入基体时,并不是所有的价电子都成为自由电子,有很大一部分电子与原来的原子仍保持结合状态。另一方面,在位错的应力场中,电子分布也要变化,于是出现了负离子与位错引起的电场之间的相互作用。但在金属中这种相互作用仅为上述的弹性交互作用的$\frac{1}{4}\sim\frac{1}{7}$。

6.1.4 几何交互作用(Geometrical Interaction)

位错与溶质原子之间的交互作用同溶质原子分布的几何位置有关,故称为几何交互作用。对由溶质原子 B 和溶剂原子 A 组成的固溶体而言,溶质原子分布的几何位置有三种可能性:

1) 随机分布:溶剂原子 A 和溶质原子 B 在点阵中所占的位置是任意的;

2) 有序分布:在每个 A 原子周围,B 原子按一定规则分布;

3) 偏聚分布:同类原子聚集在一起成群分布。

上述三种溶质原子分布情况主要取决于 A 和 B 两种原子间结合能的相对关系,可用下面的参数来描述:

$$\phi=\frac{1}{2}(U_{AA}+U_{BB})-U_{AB}$$

式中 U_{AA}——A 和 A 原子间的结合能;余者类推。

若 $\phi=0$ 时,呈随机分布;$\phi>0$ 时,呈有序分布;$\phi<0$ 时,呈偏聚分布。在这里主要讨论溶质原子的有序分布对位错运动的影响。

溶质原子的有序分布分为短程有序和长程有序两种,其有序度分别用 σ 和 S 表示。σ 的定义为:

$$\sigma=\frac{q-q_r}{q_m-q_r}$$

式中 q——某一给定原子周围出现异类原子对 AB 的数目;

q_m——异类原子对 AB 的最大可能数目;

q_r——混乱分布时平均的异类原子对 AB 的数目。

S 的定义如下：

$$S=\frac{p-r}{1-r}$$

式中　p——超点阵中 A 亚点阵的结点上出现 A 原子的几率；

r——A 原子在合金中的原子分数。

A　短程有序(Short-Range Order)引起的强化

短程有序可有效地阻碍位错运动而引起强化。如图 6.4 所示，当位错切过短程有序区时，会破坏短程有序。图 6.4(a)中，滑移面上有 11 个异类原子对；当滑移一个柏氏矢量后，异类原子对减为 9 个，如图 6.4(b)所示。也就是说，当位错滑移通过短程有序区时，由于异类原子对数目的改变，系统的能量升高，故需外力附加作功，从而使强度升高。当异类原子的交互作用能较大时，易形成短程有序。

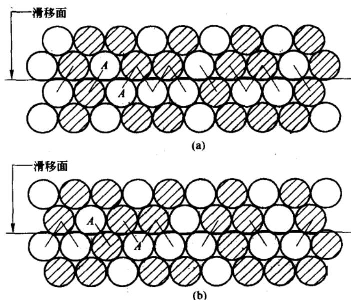


图 6.4　滑移破坏短程有序

B　长程有序(Long-Range Order)引起的强化

如图 6.5 所示，当溶质原子呈长程有序分布时，可在滑移面两侧原子之间形成 AB 型原子匹配关系。当有位错在滑移面上运动时，会不断破坏这种有序关系，形成反相畴界(Antiphase Domain Boundary)。故单个位错只有在附近的外力作用下才能运动，以补偿形成反相畴界所需的能量。

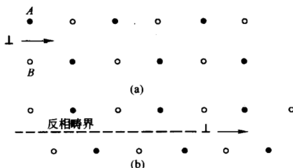


图 6.5 单位错运动形成反相畴界示意图

(a) 在滑移面两侧原子间呈 AB 型有序排列;(b) 在运动位错扫过区域形成反相畴界

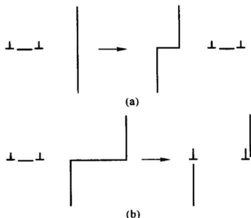


图 6.6 超点阵位错与反相畴界的交互作用

(a) 超点阵位错切过反相畴界引起两个原子长台阶;(b) 领先位错扫过反相畴界时引起超点阵解体

在长程有序合金中,位错易于以超点阵位错的形式成对运动。这种超点阵位错是由两个同号全位错以反相畴界相连所组成的位错对,如图 6.6 所示。要使超点阵位错运动,无需额外加力,因为由领先位错形成的反相畴界,可通过与其成对的后续位错追踪运动所销毁,结果系统能量不变。但若晶体中已存在反相畴界时,也可成为超点阵位错运动的有效障碍。如图 6.6(a)所示,当超点阵位错穿越反相畴界时,会使反相畴界产生两个原子长的台阶,导致系统能量升高。这不但会在主滑移面上形成反相畴界,造成次滑移中位错运动的困难,而且在主滑移面上有超点阵位错继续滑移时,还会形成如图 6.6(b)所示的组态,使主滑移受阻。因为领先位错通过滑移面上的反相畴界时,可使之消除而引起超点阵位错解体,于是领先位错与尾随位错分别在断开的两反相畴界处受阻。它们均使强度升高。

在长程有序合金中,反相畴界尺寸对合金强度有很大影响,适当减小反相畴界尺寸,可使反相畴界数量增多,有利于强化;但同时,由于反相畴界尺寸过小,又使长程有序度显著减小,降低有序强化效应。最佳反相畴

界尺寸为 3～10 nm。如 Mg_3Cd 合金经 180℃ 淬火和随后 68℃ 等温退火时，退火时间对长程有序度、反相畴界尺寸及硬度的影响见图 6.7，可见在反相畴界尺寸为 6 nm 时，出现硬化峰。

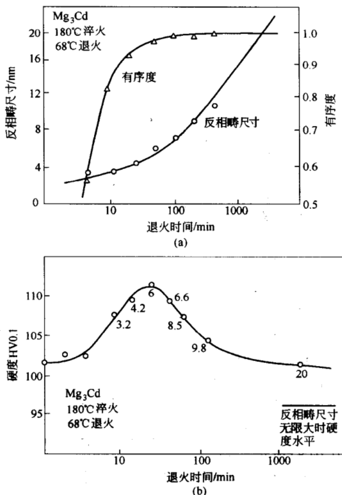


图 6.7 Mg_3Cd 合金中硬度与长程有序度和反相畴界尺寸的关系

(a) 有序度参数与反相畴尺寸的变化；(b) 硬度的变化(图中数字表示反相畴尺寸，nm)

6.2 第二相粒子强化效应(Strengthening Effect of Second phase Particles)

通常将第二相粒子强化分为沉淀强化(Precipitation Strengthening)与弥散强化(Dispersion Strengthening)两类。但就障碍机制而言，趋向于

以粒子本身的变形特性作为区分第二相强化机制的出发点。对可变形粒子,粒子的性能是影响强化效果的关键,而粒子尺寸的影响较小。对不可变形粒子,强化效果主要取决于粒子尺寸及弥散度,而与粒子本身性能无关。两种粒子强化机制的控制因素虽有区别,但强化效果均随粒子的体积分数增大而提高。

两种第二相粒子的强化效果与粒子的尺寸的关系如图 6.8 所示。曲线 B 表明,随着可变形粒子尺寸的增加,强化效果增大。在时效早期溶质原子含量未达到平衡浓度时,强化效果也随可变形粒子的体积分数增大而增大;对不可变形粒子,在粒子的体积分数不变的条件下,强化效果随粒子尺寸增大而减小,如曲线 A 所示。两种强化机制在 P 点发生过渡,并给出时效峰。若增加沉淀相粒子的体积分数,可使曲线 A 和 B 升高,给出较高的峰强度。提高沉淀相粒子本身的强度时,会使曲线 B 升高,有利于在较小的粒子尺寸下得到较高的峰强度。为提高合金的时效强度,在时效时应使粒子的平均尺寸达到峰强度所对应的尺寸之前,使沉淀相粒子大量充分形核并达到足够的体积分数。下面分别介绍可变形粒子的强化效应和不可变形粒子的强化效应。

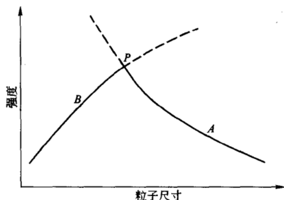


图 6.8 可变形粒子(曲线 B)及不可变形粒子(曲线 A)的尺寸对合金强度的影响

6.2.1 可变形粒子的强化效应(Strengthening Effects of Deformable Particles)

当第二相粒子为可变形微粒时,位错将切过粒子使之随同基体一起变形,图 6.9 为 IF 钢中第二相粒子被位错切过的透射电镜照片,其示意图见图 6.10 所示。在这种情况下,强化作用主要决定于粒子本身的性质,以及

与基体的联系，其强化机制非常复杂，且因合金而异，其主要作用如下：

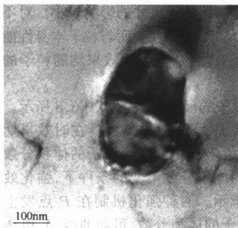


图 6.9 IF 钢中第二相粒子被位错切过的透射电镜照片

1) 位错切过粒子时，粒子产生宽度为 b 的表面台阶，由于出现了新的表面积，使总的界面能升高。

2) 当粒子是有序结构时，则位错切过粒子时会打乱滑移面上下的有序排列，产生反相畴界，引起能量的升高。

3) 由于第二相粒子与基体的晶体点阵不同或至少是点阵常数不同，故当位错切过粒子时必然在其滑移面上引起原子的错排，需要额外做功，给位错运动带来困难。

4) 由于粒子与基体的比体积差别，而且沉淀粒子与母相之间保持共格(Coherent)或半共格结合，故在粒子周围产生弹性应力场，此应力场与位错会产生交互作用，对位错运动有阻碍。

5) 由于基体与粒子中的滑移面取向不一致，则位错切过后会产生一割阶，割阶存在会阻碍整个位错线的运动。

6) 由于粒子的层错能与基体不同，当扩展位错通过后，其宽度会发生变化，引起能量升高。

以上这些强化因素的综合作用，使合金(Alloy)的强度得到提高。

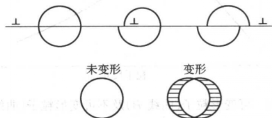


图 6.10 位错切过粒子的示意图

6.2.2 不可变形粒子的强化效应

工程上重要的合金，第二相质点的含量并不大，但却极弥散地分布在基体上，在很多情况下，这些第二相是中间相，具有比基体大得多的硬度，

利用热处理方法可有效地控制第二相的大小和分布。刚淬火(Quenching)的过饱和固溶体合金是软的,发生第二相沉淀后变硬,继续时效质点变大,硬度下降。合金硬度为沉淀质点大小的函数,见图 6.11。

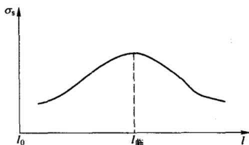


图 6.11 合金硬度与沉淀质点大小的关系

图中 l_0 为淬火合金中固溶原子间距,对典型合金成分,约等于 3 个原子间距。$l = l_{临界}$时,强度最大,约为 25~50 个原子间距;过时效时,质点间距可达 1000 个原子间距或更多,强度下降。质点强化作用分三个阶段,见图 6.12。

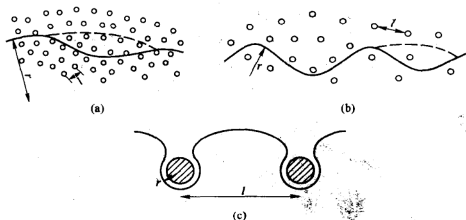


图 6.12 可弯位错在弥散质点场中的运动

质点成分不同于基体,引起了体积改变,质点周围形成应力场,这些局部的内应力对位错有阻碍作用。但这种阻碍作用能够发生的条件是位错有"柔性",也就是位错可以沿着质点引起的应力场弯曲,而取得最小的位能。

如果认为位错是不能弯曲的"刚硬"直线,则在此直线两侧内的应力场分布相似,对位错的作用互相抵消,不会引起硬化。不过,位错弯曲所能达到的尖锐程度有一定限制,否则,位能也会太高,因此质点非常弥散

时，位错线只能跨过它们，见图 6.12(a)。

位错弯曲的平衡条件是：

$$\tau = \frac{\mu b}{2r}$$

式中　τ——切应力；

b——位错本身的柏氏矢量；

r——曲率半径；

μ——切变模量。

位错的弯曲半径为：

$$r = \frac{1}{2}\frac{\mu b}{\tau}$$

当质点间距 $l < r$ 时，位错的弯曲不能像应力场变化得那样急剧，表现出一定的“软”性，位错线两边的应力场部分地互相抵消，得不到最大强化。在极端情况下，如刚淬火的合金，l 仅为几个原子间距，为了得到这样小的位错曲率半径，内应力应与切变模量同数量级，而实际上，溶质原子周围所能引起的应力不大于 $\mu/100$。所以，位错线通过高度分散的溶质原子后几乎为直线，无强化效果。

当 $l = r$ 时，位错线所能达到的曲率，恰好与质点间距相等。位错所遇到的阻碍等于它所面临的质点应力场的作用的算术和，因而合金得到最大强化。这时 $l = l_{临界}$，约 20～100 原子间距，见图 6.12(b)。

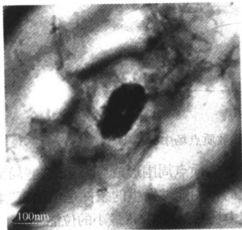


图 6.13　IF 钢中第二相粒子被位错绕过的透射电镜照片

若 l 再增大，位错线足够“柔软”，绕过质点所需的应力却要降低，所以开始软化，见图 6.12(c)。

位错绕过第二相质点时，要在质点周围留下一个位错环，使质点有效尺寸增加，而质点间距减小，于是引起变形应力增大，图 6.13 为 IF 钢中第二相粒子被位错绕过的透射电镜照片，其示意图见图 6.14 所示。其结果是使得在有弥散相质点的合金中加工硬化速度更快。应用弥散强化的方法，可使 Al 合金 σ_s 达到 500 MPa，比纯铝

几乎高10倍。

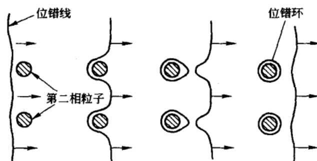


图6.14 位错绕过第二相粒子的示意图

应注意以下两个问题：

1）由于第二相质点与基体之间的连接，使质点周围的基体处于弹性应力状态，由此而引起的质点的有效尺寸的作用可能比其实际尺寸大得多。

2）质点本身的性质对合金强度和韧性也将起显著的作用。

用极薄的合金片在电镜下观察可知，滑移带通过质点时有三种情况：

① 使质点弯曲，说明位错可通过质点，切割机制；

② 滑移带绕过质点，说明位错绕过质点，增加表面积，增加表面能，绕过机制，增殖机构；

③ 滑移带停止在质点前，而使质点产生裂缝。这些现象显然是和质点的大小、性质和基体的联系有关。

6.3 晶界强化效应(Grain Boundary Strengthening Effect)

多数晶体物质是由许多晶粒所组成，属于同一固相但位向不同的晶粒之间的界面称为晶界，它是一种内界面；而每个晶粒有时又由若干个位向稍有差异的亚晶粒所组成，相邻亚晶粒间的界面称为亚晶界。晶粒的平均直径通常为0.015～0.25 mm范围内，而亚晶粒的平均直径则通常为0.001 mm数量级。

为了描述晶界和亚晶界的几何性质，需说明晶界的取向及其两侧晶粒的相对位向。二维点阵中晶界的几何关系可用图6.15来描述，即晶界位置可用两个晶粒的相对位向差 θ 和晶界相对于一个点阵某一平面的夹角 φ 来确定。而三维点阵的晶界几何关系应由五个位向角度确定。设想将图6.16(a)所示晶体沿 $x-z$ 平面切开，然后让右侧晶体绕 x 轴旋

转,这样就会使两个晶体之间产生位向差。同样,右侧晶体还可以绕 y 或 z 轴旋转。因此,为了确定两个晶体之间的位向,必须给定三个角度。现在再来考虑位向差一定的两个晶体之间的界面。如图 6.16(b)所示,若在 $x-z$ 平面有一个界面,将这个界面绕 x 或 z 轴旋转,可以改变界面的位置;但绕 y 轴旋转时,界面的位置不变。显然,为了确定界面本身的位向,还需要确定两个角度。这就是说一般空间点阵中的晶界具有五个自由度。

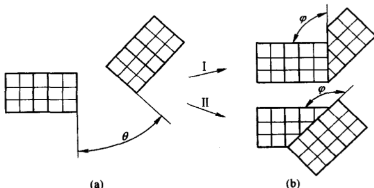


图 6.15　二维平面点阵中的晶界

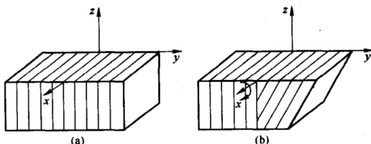


图 6.16　三维点阵中的晶界

根据相邻晶粒之间位向差 θ 的大小不同将晶界分为两类:1)小角度晶界:相邻晶粒之间位向差小于 10°晶界;亚晶界均属于小角度晶界,一般小于 2°;2)大角度晶界:相邻晶粒的位向差大于 10°晶界,多晶体中 90%以上的晶界属于此类。

6.3.1　小角度晶界的结构(Structure of Low Angle Grain Boundary)

按照相邻亚晶界之间位向差的形式不同,可将小角度晶界分为倾斜晶界、扭转晶界和重合晶界等。它们的结构可用相应的模型来描述。

A 对称倾斜晶界 (Symmetric Tilt Grain Boundary)

对称倾斜晶界可看作把晶界两侧晶体互相倾斜的结果,见图 6.17。由于相邻两晶粒的位向差 θ 角很小,其晶界可看成是由一列平行的刃型位错所构成,见图 6.18。位错的间距 D 与柏氏矢量 b 之间的关系为:

$$D=\frac{b}{2\sin\frac{\theta}{2}}$$

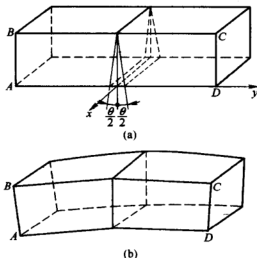


图 6.17 对称倾斜晶界的形成

(a) 倾斜前;(b)倾斜后

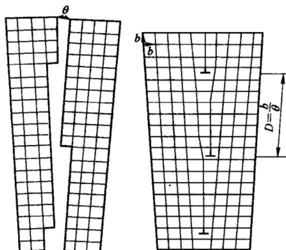


图 6.18 倾斜晶界

当 θ 很小时，$\frac{b}{D} \approx \theta$。

B 不对称倾斜晶界

如果倾斜晶界的界面绕 x 轴旋转了一个角度 φ，如图 6.19 所示，则此时两晶粒之间的位向差仍为 θ 角，但此时晶界的界面对于两个晶粒是不对称的，因此，称为不对称晶界。它有两个自由度 θ 和 φ。该晶界结构可看成由两组柏氏矢量相互垂直的刃型位错 $b_{\perp}$ 和 $b_{\vdash}$ 交错排列而构成的。两组刃型位错各自的间距 $D_{\perp}$ 和 $D_{\vdash}$ 可根据几何关系分别求得，即：

$D_{\perp} = b_{\perp}/\theta\sin\varphi \quad D_{\vdash} = b_{\vdash}/\theta\cos\varphi$

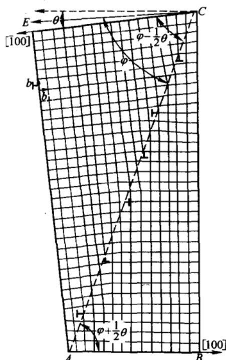


图 6.19 不对称倾斜晶界

C 扭转晶界（Twist Grain Boundary）

扭转晶界是小角度晶界的又一种类型。它可看成是两部分晶体绕某一轴在一个共同的晶面上相对扭转一个 θ 角所构成的，扭转轴垂直于这一共同的晶面，如图 6.20 所示。它的自由度为 1。

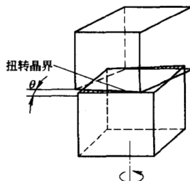


图 6.20 扭转晶界的形成过程

该晶界的结构可看成是有互相交叉的螺型位错所组成,如图 6.21 所示。

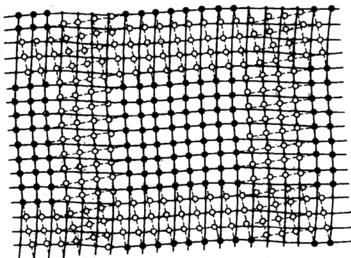


图 6.21 扭转晶界位错模型

纯扭转晶界和倾斜晶界均是小角度晶界的简单情况,两者不同之处在于倾斜晶界形成时,转轴在晶界内;而扭转晶界的转轴垂直于晶界。在一般情况下,小角度晶界都可看成是两部分晶体绕某一轴旋转一角度而形成的,只不过其转轴既不平行于晶界也不垂直于晶界。对这样的任意小角度晶界,可看作是由一系列刃型位错、螺型位错或混合位错的网络所构成,这已被实验所证实。

6.3.2 大角度晶界的结构(Structure of High Angle Grain Boundary)

多晶体材料中各晶粒之间的晶界通常为大角度晶界。大角度晶界的结构较复杂,其中原子排列较不规则,不能用位错模型来描述。对于大角度晶界结构的了解远不如小角度晶界清楚,有人认为大角度晶界的结构接近于图 6.22 所示的模型。图中表明取向不同的相邻晶粒的界面不是光滑的曲面,而是由不规则的台阶组成的。分界面上既包括有同时属于两晶粒的原子 D,也包含有不属于任一晶粒的原子 A;既包含有压缩区 B,也包含有扩张区 C。这是由于晶界上的原子同时受到位向不同的两个晶粒中原子的作用所致。总之,大角度晶界上原子排列比较紊乱,但也存在一些比较整齐的区域。因此,晶界可看成坏区和好区交替相间组合而成。随着位向差 θ 的增大,坏区的面积将相应增加。纯金属中大角度

晶界的宽度不超过 3 个原子间距。

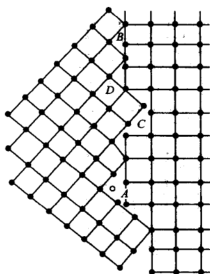


图 6.22 大角度晶界模型

近年来，有人应用场离子显微镜研究晶界，提出了大角度晶界的“重合位置点阵”模型，并得到实验证实。如图 6.23 所示，在二维正方点阵中，当两个相邻晶粒的位向差为 37°时(相当于晶粒 2 相对晶粒 1 绕某固定轴旋转了 37°)，若设想两晶粒的点阵彼此通过晶界向对方延伸，则其中一些原子将出现有规律的相互重合。由这些原子重合位置所组成比原来晶体点阵大的新点阵，通常称为重合位置。由于在上述具体图例中，每 5 个原子即有 1 个是重合位置，故重合位置点阵密度为 1/5 或称为 1/5 重合位置点阵。显然，由于晶体结构及所选旋转轴与转动角度的不同，可以出现不同重

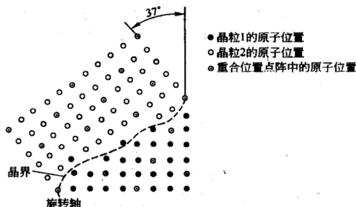


图 6.23 当两相邻晶粒位向差为 37°时，存在的 1/5 重合位置点阵

合位置密度的重合点阵。下表列出了立方晶系金属中重要的重合位置点阵。

根据该模型，在大角度晶界结构中将存在一定数量重合点阵的原子。显然，晶界上重合位置愈多，即晶界上愈多的原子为两个晶粒所共有，原子排列的畸变程度愈小，则晶界能也相应愈低。然而从表中得知，不同晶

体结构具有重合点阵的特殊位向是有限的。所以,重合位置点阵模型尚不能解释两晶粒处于任意位向差的晶界结构。

立方系金属中重要的重合位置点阵

晶体结构	旋转轴	转动角度/(°)	重合位置密度
体心立方	[100]	36.9	1/5
	[110]	70.5	1/3
	[110]	38.9	1/9
	[110]	50.5	1/11
	[111]	60.0	1/3
	[111]	38.2	1/7
面心立方	[100]	36.9	1/5
	[110]	38.9	1/9
	[111]	60.0	1/7
	[111]	38.2	1/7

总之,对于大角度晶界的结构还正在继续研究和讨论中。

6.3.3 晶界能(Grain Boundary Energy)

由于晶界上的原子排列是不规则的,有畸变,从而使系统的自由能提高。晶界能定义为形成单位面积界面时,系统的自由能变化$\left(\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}A}\right)$,它等于界面区单位面积的能量减去无界面时该区单位面积的能量。

小角度晶界的能量主要来自位错能量(形成位错的能量和将位错排成有关组态所做的功),而位错密度又决定于晶粒间的位向差,所以,小角度晶界能 γ 也和位向差 θ 有关:

$$\gamma = \gamma_0\theta(A - \ln\theta)$$

式中,$\gamma_0 = \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)}$为常数,取决于材料的切变模量 μ、泊松比 ν 和柏氏矢量 b;A 为积分常数,取决于位错中心的原子错排能。

由上式可知,小角度晶界能是随位向差增大而增大(见图 6.24)。但要注意,该公式只适用于小角度晶界,而对于大角度晶界不适用。

实际上,多晶体(Polycrystal)的晶界一般为大角度晶界,各晶粒的位向差大多在 30°~40°左右,实验测出各种金属大角度晶界能约在 0.25~1.0 J/m² 范围内,与晶粒之间位向差无关,大体为定值,如图 6.24 所示。

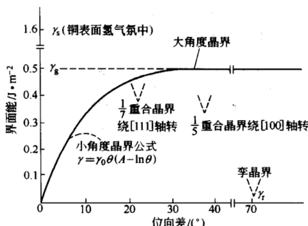


图 6.24　铜的不同类型界面的界面能

晶界能可以界面张力的形式来表现，且可以通过界面交角的测定求出它的相对值。图 6.25 所示为当 3 个晶粒相遇时，它们两两相交于一个界面，3 个界面相交于 1 个三叉界棱。在达到平衡状态时，0 点处的晶界张力 γ_{1-2}，γ_{2-3}，γ_{3-1}必须达到力学平衡，即其矢量和为零，故

$$\gamma_{1-2}+\gamma_{2-3}\cos\varphi_2+\gamma_{3-1}\cos\varphi_1=0$$

或

$$\frac{\gamma_{1-2}}{\sin\varphi_3}=\frac{\gamma_{2-3}}{\sin\varphi_1}=\frac{\gamma_{3-1}}{\sin\varphi_2}$$

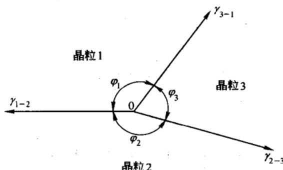


图 6.25　三个晶界相交于一直线(垂直于图面)

因此，若取其中某一晶界能作为基准，则通过测量 φ 角即可求得其他晶界相对能量。

在平衡状态下，三叉晶界的各面角均趋向于最稳定的 120°，此时，各晶粒之间的晶界能基本相等。

6.3.4 晶界的特性(Grain Boundary Characteristics)

晶界有如下特性:

1) 晶界处点阵畸变大,存在着晶界能。因此,晶粒的长大和晶界的平直化都能减少晶界面积,从而降低晶界的总能量,这是一个自发过程。然而晶粒的长大和晶界的平直化均需要通过原子的扩散来实现,因此,随着温度升高和保温时间的延长,均有利于这两过程的进行。

2) 晶界处原子排列不规则,因此在常温下晶界的存在会对位错的运动起阻碍作用,致使塑性变形抗力提高,宏观表现为晶界较晶内具有较高的硬度和强度。晶粒越细,材料的强度越高,这就是细晶强化(Fine-Grained Strengthening);而高温下则相反,因高温下晶界存在一定的黏滞性,易使相邻晶粒产生相对滑动。

3) 晶界处原子偏离平衡位置,具有较高的动能,并且晶界处存在较多的缺陷,如:空穴、杂质原子和位错等,故晶界处原子的扩散速度比在晶内快得多。

4) 在固态相变过程中,由于晶界能量较高且原子活动能力大,所以新相易于在晶界处优先形核。显然,原始晶粒越细,晶界越多,则新相形核率也相应越高。

5) 由于成分偏析和内吸附现象,特别是晶界富集杂质原子情况下,往往晶界熔点较低,故在加热过程中,因温度过高将引起晶界熔化和氧化,导致“过热”现象产生。

6) 由于晶界能量较高、原子处于不稳定状态,以及晶界富集杂质原子的缘故,与晶内相比,晶界的腐蚀速度一般较快。这就是用腐蚀剂显示金相样品组织的依据,也是某些金属材料在使用中发生晶内腐蚀破坏的原因。

6.3.5 晶界对金属塑性(Metallic Plasticity)的影响

已经知道,当应力作用在多晶体金属上的时候,试样内的每一个晶粒并不像无约束存在的单晶那样地发生变形。多晶体组成的金属的强度比单晶的高得多,就间接地证明了这一点。目前,人们常把大角度晶界更简单地看成一个表面,它大约只有两个原子厚,在这个表面内原子的排列是无规则的;而不把它看成是由位错组成的。然而,由于晶界内部的原子排

列已经紊乱，所以当把位错中心的无规则性再引入晶界的时候，它们对晶界原子的错排能影响不大。晶界对位错产生的作用力是吸引力，位错将被吸引到晶界的近旁。另一方面，由于在晶界处滑移方向和滑移面因相邻晶粒取向不同而改变，所以晶界对面的晶粒作用到位错上的力是排斥力。

越过晶界时，晶粒的取向将发生改变这一事实对于滑移过程是重要的。通过双晶实验可以证明这一点。在双晶实验中，人们发现，随着两个晶体间取向差别的减少，两个晶体中的滑移面和滑移方向趋于一致，双晶的力学性质也就逐渐地从多晶体的性质转变为单晶体的性质。另一个实验是“竹节”试样实验。在竹节试样中，晶界彼此平行，并且都垂直于拉伸轴的方向。起初，滑移引起的变形只是在最有利取向的晶粒内出现，而后扩展到其他一切晶粒。还发现各个晶粒的晶界附近包含有一个楔形区域（图 6.26a），在这个区域中没有发生滑移。这就表示滑移从一个晶粒发展延续到下一个晶粒是很困难的。据此，自然会联想到一般的多晶体中

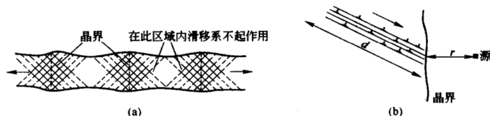


图 6.26　晶界对滑移的影响

会发生更为复杂的情况。因为在更多的晶体组成的材料中，滑移总要与晶界接触，因而滑移比竹节情况要困难，强度也比竹节试样要高。许多试验都证实了屈服应力与多晶体的晶粒尺寸之间呈下列关系：

$$\sigma = \sigma_i + kd^{-\frac{1}{2}}$$

式中　σ_i——点阵摩擦力；

d——晶粒直径；

k——常数。

这个公式常称为霍尔(Hall)－佩奇(Petch)关系式。这个关系可以应用位错的基本理论推导出来。

由于位错很难通过晶界从一个晶粒移动到另一个晶粒中去，多晶体

的滑移过程不能依靠位错穿过晶界而传播到每个晶粒,所以位错在晶界处塞积起来。塞积群中的位错能够在其附近产生应力集中,并可能在邻近晶粒内部触发位错源,使其开动(图 6.26b)。在距离领先位错 r 处的应力集中正比于 $\left(\frac{d}{4r}\right)^{\frac{1}{2}}$,而外加应力如果是 τ 的话,r 处的切应力就是 $(\tau-\tau_i)\left(\frac{d}{4r}\right)^{\frac{1}{2}}$,其中的 d 代表塞积着位错的晶粒尺寸,τ_i 代表摩擦应力。

当 r 处的切应力达到其极大值时,r 处的位错源即被开动,即

$$(\tau-\tau_i)\left(\frac{d}{4r}\right)^{\frac{1}{2}}=\tau_{max}$$

可以将之改写成

$$\tau=\tau_i+(\tau_{max}\times 2r^{\frac{1}{2}})d^{-\frac{1}{2}}$$

或者

$$\tau=\tau_i+k_s d^{-\frac{1}{2}}$$

因此,可以导出多晶体的拉伸流变应力的公式为

$$\sigma=m(\tau_i+k_s d^{-\frac{1}{2}})=\sigma_i+kd^{-\frac{1}{2}}$$

式中 m——外加张应力相对于切应力 τ 的取向因数,即 $\sigma=m\tau$。

根据拉伸时的分切应力关系知道,对于单晶体,m 具有最小值 2。但在多晶体中,变形可以出现在取向不利的晶粒内部等处,因此,因数 m 相当高。

在宏观的尺度上,在导出多晶体的不同晶粒内部的临界切应力时,应用了取向因数,而在开动受阻滑移带前面的一个位错源时,也存在着一个局部区域的取向因数问题。一般来说,位错源的滑移面并不在最大切应力的平面内,因此 τ_{max}必须大到足以在位错源的滑移面内开动新位错源的切应力 τ_c 的程度。涉及毗邻晶粒取向关系的局部取向因数,通常是不同于滑移面相对于应力轴取向的宏观取向因数,因此有 $\tau_{max}=m'\tau_c/2$ 然而,为简单起见,可以假定 $m'=m$,所以霍尔-佩奇关系式中的参数

$$k=m^2\tau_c r^{\frac{1}{2}}$$

通过以上的论述,我们知道参数 k 基本上由两个因素所决定。第一个为开动一个位错源所需的应力,它取决于该位错被钉扎的强弱程度,强

钉扎意味着 τ_c 大。第二个因素是包含在由可以利用的滑移系数目所决定的参数 m 之内。滑移系的数目大意味着 k 小;反之,k 就大。面心立方金属的 k 小,密排六方金属的 k 大,体心立方由于具有强钉扎位错,k 值也较大。k 值小,表示流变应力对于晶粒尺寸的依赖性不明显。

6.4 加工硬化效应(Work-Hardening Effect)

随着塑性变形程度的增加,晶体对滑移的阻力愈来愈大。从位错理论的角度看,其主要原因是位错运动愈来愈困难。滑移变形的过程就是位错运动的过程,如果位错不易运动,就是材料不易变形,也就是材料强度提高,即产生了加工硬化。加工硬化现象在生产工艺上有很现实的作用,如拉丝时已通过拉丝模的金属截面积变小,因而作用在这一较小截面积上的单位面积拉力比原来大,但是由于加工硬化,这一段金属可以不继续变形,反而引导拉丝模后面的金属变形,从而才能进行拉拔;又如冲压时已变形部分的金属由于加工硬化不再变形,而让较软的未变形部分变形,从而才能实现冲压时的均匀变形。

加工硬化对金属材料的使用也是有利的,例如构件在承受负荷时,尽管局部地区负荷超过了屈服强度,金属发生塑性变形,但通过加工硬化,这部分金属可以承受这一负荷而不发生破坏,并把部分负荷转嫁给周围受力较小的金属,从而保证构件的安全。与此类似,加工硬化率高的金属,拉伸变形时不易产生颈缩(Necking),从这个意义来说它可以推迟断裂的发生。加工硬化现象很复杂,它涉及大量位错的运动、增殖和交互作用问题,有其理论上的特点,因此,对加工硬化现象的研究无论在实际上和理论上均有重要意义。

6.4.1 单晶体(Single Crystal)的加工硬化

图 6.27 表示出几种典型的金属单晶体的加工硬化曲线。从图中可以看出晶体结构对加工硬化曲线的影响:六方金属单晶体只能沿一组滑移面进行滑移,加工硬化曲线的斜率很小,也就是加工硬化率(用 $\theta = d\tau/d\varepsilon$表示)很低;立方金属可以同时开动多个滑移系统,呈现很强的加工硬化效应。如果把立方晶体的滑移限制在一个滑移系统上,则加工硬化率也很低。因此,可以认为,强烈的加工硬化的根源,在于位错在相交的滑移面上滑移的相互干扰作用。

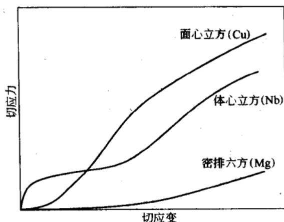


图 6.27 典型金属单晶体的应力－应变曲线

由于面心立方金属的单晶体的加工硬化曲线具有代表性,对它的研究比较深入。图 6.28 是概括了大量实验结果而得出的面心立方金属单晶的加工硬化曲线。整个加工硬化可以分为三个阶段:

第Ⅰ阶段:又称为易滑移阶段,硬化率很低,与六方金属的硬化率相近,$\theta_{\mathrm{I}}=d\tau/d\varepsilon$,在铜单晶中约为 2×10^{-4} μm,它紧接着屈服之后发生。

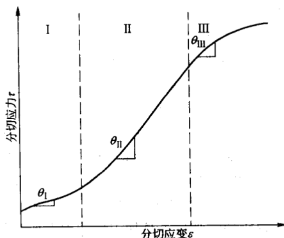


图 6.28 面心立方单晶体的加工硬化曲线

第Ⅱ阶段:又称为线性硬化阶段。这一阶段的特点是加工硬化迅速增加,其曲线斜率与外加应力、取向关系等的关系不大,而且各种面心立方金属的 θ_{II}/μ 近似相等,大约都是 1/300。直接观察表明,位错一般是

以缠结的形式出现,并看到主、次滑移系统中位错交互作用的迹象。在这个阶段的后期,出现不规则的胞状组织,滑移线很短。

第Ⅲ阶段:特点是 θ_{III} 随应变增加而减少,故又称为抛物线硬化阶段。此时胞状组织明显出现,这一阶段的起点显著地依赖于温度。

加工硬化第一阶段的电子显微镜观测表明,试样表面上的滑移线相当长(大约为 1 mm),滑移线的间隔很近,滑移台阶很小,相当于通过几个位错。由于在这个阶段中没有次滑移系上的滑移来妨碍主滑移系上的位错运动,所以从位错源开动的难易程度,就可以确定易滑移阶段中的流变应力。塞格(Seeger)等人根据他们对第一阶段加工硬化原因的分析,主滑移系上各位错环间的相互作用,得出了加工硬化第一阶段的公式为

$$\theta_{\mathrm{I}}=\frac{\mu}{2\pi}\left(\frac{d}{L}\right)$$

或更精确些的式子为

$$\theta_{\mathrm{I}}=\frac{8\mu}{9\pi}\left(\frac{d}{L}\right)^{3/4}$$

式中　d——相邻滑移面之间的距离;

　　　L——每一个位错环移动的距离。

代入典型数据,即取 $d=30$ nm, $L=0.5$ mm,就得到第一阶段加工率近似值为 3×10^{-4} μm,这和实测值接近。

加工硬化第二阶段的特点是,在主滑移和次滑移上都产生滑移。因此,可以形成好几种新的点阵无规则性。这些无规则性包括林位错、罗曼-柯垂尔障碍和割阶。这种割阶是由于运动位错切割林位错或者由于林位错切割原位错而产生的。一般来说,可以把流变应力(Flow Stress)看成是足以开动一个位错源的应力。这样,流变应力 τ 可以使位错反抗以下几种应力而运动:1)林位错产生的内弹性应力;2)障碍后面的位错塞积群产生的长程应力;3)割阶产生的摩擦阻力。

加工硬化第三阶段的宏观特点是加工硬化率有所降低。这表明在第二阶段中被阻挡住的位错,在足够高的应力或者温度下,可以借助于某种过程而运动。这些过程在较低的应力和温度下是被抑制的。与实验观测最符合的最简单过程的机制是在第二阶段中被阻挡的螺型位错的交滑移,并且有可能通过双交滑移而返回原始滑移面。根据这一机制,位错可以在它们的滑移面内避开障碍,因而不必与这些障碍发生强交互作用。

金属中位错的这一性能,引起了滑移距离的增加和加工硬化率的下降。我们还可以设想,由于进行交滑移而离开滑移面的螺型位错,也可以在平行平面上遇到位错,并与符号相反的位错相互吸引以至互毁。互毁的位错,至少会被位错源产生的位错补充一部分。继续重复这一过程,就会导致滑移带的形成。这也是第三阶段的一个重要特点。第三阶段中发生的硬化,是由于位错圈中的刃型位错部分引起的。这些位错圈保持在晶体内部,随着位错源的继续开动,它们的密度也增加。

交滑移、位错互毁等使第三阶段加工硬化率较低的过程都强烈地依赖于温度。图 6.29 所示的加工软化现象就突出地说明了这一点。这个图示意地表示出晶体处在以下三个状态时的应力 - 应变曲线:1)在低温 T_1 下变形至加工硬化第二阶段的末期;2)卸载;3)在高温 T_2 下再加载。由图可知,在外加应力和较高温度的联合影响之下,低温 T_1 时达到的加工硬化状态变得不稳定了。如果在温度 T_2 下产生变形,那么就要开始出现倾向于减少在温度 T_1 下本来可以达到的加工硬化程度的大变动过程。而决定这种加工软化速率的也是交滑移,很类似于第三阶段开始时所出现的情况:即低温下形成的平衡位错结构,由高温下的热激活的交滑移而快速解体,应力逐渐达到较低值。

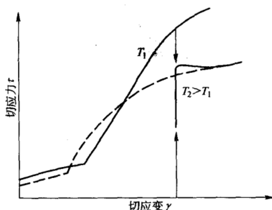


图 6.29 温度变化引起的加工软化

从层错能对交滑移过程所起的作用,可以看出它对决定应力 - 应变曲线也起重要作用。很低的层错能造成很宽的堆垛层错带,因此,在适当的应力水平下,交滑移是很难发生的。这样,螺型位错不能从它们的滑移

面上脱离,所以其滑移距离很小,位错密度很高,因而加工硬化曲线从第二阶段到第三阶段的过渡就要被推迟。在铝中,由于层错能高,堆垛层错带的宽度很窄,所以室温下就可以发生交滑移过程。除非在低温下进行实验,其加工硬化的第二阶段就很难发现。这些都与位错密度和位错排列的实际观察相符合。

以上讨论的仅是面心立方单晶体的加工硬化问题。加工硬化曲线不仅受溶质原子、第二相质点、晶界和亚晶界等一些影响位错运动的因素所左右,甚至还受到加力方向亦即晶体取向的影响。图 6.30 绘出铜单晶的室温变形结果。硬化曲线上的短线标志第二阶段硬化的开始与终止。说明不同方向的硬化能力是不同的。图 6.31 总结了这些结果:软区域主要为单滑移;其他部分为硬区域,主要是多滑移。这些图与位错硬化的理论是一致的。

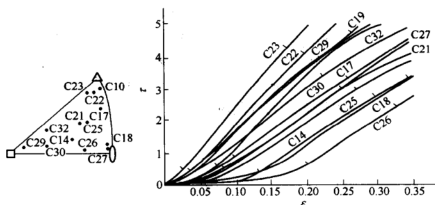


图 6.30　晶体取向对铜单晶应力 - 应变曲线的影响

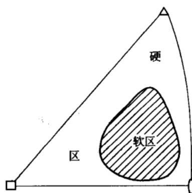


图 6.31　铜单晶中的软区和硬区的取向

类似的情况也出现在六方金属中,图6.32是高纯锌室温时的应力—应变曲线,说明在条件合适时六方金属中也可能得到包括三个阶段的硬化曲线。有人发现过体心立方金属中的硬化曲线也受不同条件作用而有变化。

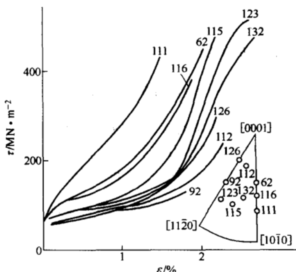


图6.32 高纯锌晶体的室温应力—应变曲线

6.4.2 多晶体的加工硬化

多晶体加工硬化的特点,主要受出现晶界这一点影响。晶界对塑性变形的作用,一是对晶内滑移的障碍作用,另一是为不致在晶界上出现裂纹,就不得不在小变形时局部地方产生多滑移。加工硬化的位错组织具有与单晶体大致相同的图像。原始的位错与次滑移的位错交互作用,可以产生偶极位错和位错环,发生局部位错缠结区,并逐步发展成为亚晶界的三维网络。亚晶胞的尺寸随着应变的增加而减小。各类金属间的结构差别,主要就在于亚晶界的显著程度不同。在具有高层错能的体心立方和面心立方金属中,位错缠结区重新排列为明显的亚晶界。但是,在具有低层错能的金属中,位错因扩散而使交滑移受到限制,即使在很大应变时,也不能形成明显的亚晶界。

当滑移从一个晶粒转入到另一个晶粒的时候,晶界起着已经多次指出的障碍物的作用,所以,晶界必定对加工硬化产生影响。此外,由于多

晶体的连续性，使得在晶界的近邻区域内随着变形的增加而产生复杂的滑移。在前面介绍竹节实验时已经可以看到一些端倪。当延伸率不超过百分之几时，加工硬化是与晶粒尺寸有关的，但在这个阶段以后，加工硬化就不再依赖于晶粒尺寸。

在已知的晶体塑性变形的方式中，除去最主要的滑移以外，尚有孪生和其他方式。在这里不对它们作进一步介绍。这些方式或多或少与位错有关系，而且必定也对加工硬化有一定作用。

6.4.3 加工硬化的理论(Theory)分析

早期泰勒根据一些多晶体的应力—应变曲线与抛物线近似的规律提出加工硬化的位错理论，假设外力与两个相距为 h 的滑移面上的位错相平衡。由位错的应力场理论可知，在这种情况下内应力场的数量级为 $\frac{\mu b}{2\pi h}$，要使位错继续运动，外加应力 τ 就必须克服这一内应力场，即

$$\tau = \frac{\mu b}{2\pi h}$$

又知，塑性变形 $\epsilon = \rho b L$。

式中 ρ——位错密度；

b——柏氏矢量；

L——位错移动的平均距离。

显然，$h \approx \frac{1}{\sqrt{\rho}}$，即 $\epsilon = \frac{bL}{h^2}$，将 τ、ϵ 项中的 h 消去，即得应力与应变的关系为

$$\tau^2 \propto \frac{\mu^2 b}{L} \cdot \epsilon$$

这一理论分析过于简单，也不能解释为什么面心立方单晶体的应力—应变曲线存在有加工硬化三个阶段的事实。在泰勒的平行位错交互作用的基础上，发展了比较系统的加工硬化理论，把加工硬化主要归结为平行位错之间的交互作用。

在第Ⅰ阶段，只有一个滑移系开动，所以此阶段的加工硬化率很低，位错运动的阻力主要是分布在各个滑移面上的位错所产生的内应力相加而造成的。

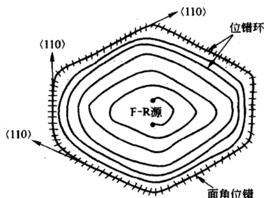


图 6.33 位错源被不动面角位错包围

在第Ⅱ阶段，由于次滑移系开动，主次滑移系上的位错交互作用生成不动的 L-C 面角不动位错，成为后续位错运动的障碍，主滑移系上的弗兰克－瑞德源逐步被不动的面角位错所包围(图 6.33)，因而加工硬化率急剧上升，滑移线逐渐变短。第Ⅱ阶段滑移线随变形量的变化满足以下经验公式，滑移线的平均长度 L 为

$$L=\frac{C}{\varepsilon}$$

设由位错源发出的 n 个塞积的正位错距位错源为 $+L$，n 个负位错距位错源为 $-L$，滑移面间的距离为 h，则位错塞积群的平均间距为 $(Lh)^{1/2}$，将塞积群的 n 个位错视为强度为 nb 的大位错，则屈服应力为

$$\tau=\frac{\mu(nb)}{2\pi(Lh)^{1/2}}$$

位错密度 ρ 现在是$\frac{n}{hL}$，故 $\varepsilon=bL=\frac{nb}{h}$

从 τ、ε 式中消去 h，可得

$$\tau^2=\frac{\mu^2(nb)}{4\pi^2L}\cdot\varepsilon$$

将 $L=\frac{C}{\varepsilon}$代入上式并微分，得

$$\frac{\mathrm{d}\tau}{\mathrm{d}\varepsilon}=\frac{\mu}{2\pi}\sqrt{\frac{nb}{C}}$$

此式为第Ⅱ阶段线性加工硬化率的表达式。实验求得

$$\frac{\mathrm{d}\tau}{\mathrm{d}\varepsilon}\approx\frac{\mu}{250},C=4\times10^{-4}\text{ cm},则\ n\approx25。$$

在加工硬化第Ⅲ阶段，处于塞积群前面的螺型位错在应力作用下脱离原来滑移面，产生了交滑移，使形变得以继续进行，并使加工硬化系数下降。具有层错的金属位错在交滑移前需要束集，因此层错能低、层错宽度大的金属第Ⅲ阶段开始的比较晚。交滑移的过程可借热激活来实现，因此 τ_3 和 θ_3 与温度和层错能的大小有关。

上述塞格的加工硬化理论虽然能较系统地说明了面心立方晶体加工硬化三个阶段的现象，但电子显微镜对金属薄膜的观察表明，除某些层错能低的合金外，实际上看不到位错塞积群，一般看到的都是位错缠结和胞状结构，在薄膜观察的基础上赫许等提出了林位错的加工硬化理论，认为在线性硬化的第Ⅱ阶段，胞状结构生成，随流变的进行，位错的平均自由程随位错密度的增加而减少，基于这一前提得出了与塞格不同的另一线性硬化的关系式。

近来有人根据薄膜晶体加工硬化的电子显微镜观察结构指出：加工硬化主要是由于位错密度的增加所致。随形变量的增加，组成三维位错网格的位错线段越来越短，胞壁发展得愈来愈完整，经过较多塑性形变后胞内的位错数目相对减少，位错可以借“拉开拉链”的方式突破一些位错网格的节点，随着位错的运动，位错的总长度不断增加，虽然在运动过程中由于交割可能使某些位错抵消，但总的来说位错密度不断增大。在塑性变形过程中大量的形变能以热的形式放出，这是由位错运动时与其他位错的弹性交互作用、位错应力场的作用以及例如割阶互相抵消等因素造成的。

参考文献

1 陈进化．位错基础．上海:上海科学技术出版社,1984
2 余宗森,田中卓．金属物理．北京:冶金工业出版社,1982
3 周如松．金属物理．北京:高等教育出版社,1992
4 王占学．塑性加工金属学．北京:冶金工业出版社,1991
5 杨德庄．位错与金属强化机制．哈尔滨:哈尔滨工业大学出版社,1991
6 D.赫尔,D.J.培根．位错导论．北京:科学出版社,1990
7 赵敬世．位错理论基础．北京:国防工业出版社,1989
8 J.弗里埃德尔．位错．北京:科学出版社,1980
9 冯端．金属物理学．北京:科学出版社,1987
10 赖祖涵．金属的晶体缺陷与力学性质．北京:冶金工业出版社,1988
11 D.Hull and D.J.Bacon. Introduction to Dislocation. Third Edition, 1984
12 J.P.Hirth and J.Lothe. Theory of Dislocations. Second Edition, 1982
13 R.W.Cahn and P.Haasen. Physical Metallurgy(2). Third Edition, 1983
14 陈梦谪．金属物理研究方法．北京:冶金工业出版社,1982
15 哈宽富．金属力学性质的微观理论．北京:科学出版社,1983
16 王亚男,宋维锡．铸铁中蠕虫状石墨微观结构．金属学报．1990,26(2):143
17 杨顺华．晶体位错理论基础．北京:科学出版社,1988
18 范继美,万光珉．位错理论及其在金属切削中的应用．上海:上海交通大学出版社,1991
19 余永宁．金属学原理．北京:冶金工业出版社,2000
20 胡赓祥,蔡珣,戎咏华．材料科学基础．上海:上海交通大学出版社,2000